并行计算

第十章 线性方程组的求解

10.1 三角形方程组的求解

10.2 三对角方程组的求解

10.3 稠密线性方程组的求解

10.4 稀疏线性方程组的求解

10.1 三角形方程组的求解

10.1.1 基本术语

10.1.2 上三角方程组的求解

基本术语

- 线性方程组的定义和符号

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \cdots + a_{1,n}x_n = b_1 \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,1}x_2 + \cdots + a_{2,n}x_n = b_2 \\ \\ a_{n,1}x_1 + a_{n,1}x_2 + \cdots + a_{n,n}x_n = b_n \end{cases}$$

记为 $AX=b$

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad x=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

10.1 三角形方程组的求解

10.1.1 基本术语

10.1.2 上三角方程组的求解

上三角方程组的求解

- 上三角方程组的回代解法并行化

(1)SISD上的回代算法

Begin

(1)for i=n downto 1 do

(1.1)$x_i=b_i/a_{ii}$

(1.2)for j=1 to i-1 do

$b_j=b_j-a_{ji}x_i$

$a_{ji}=0$

endfor

endfor

End

可并行化

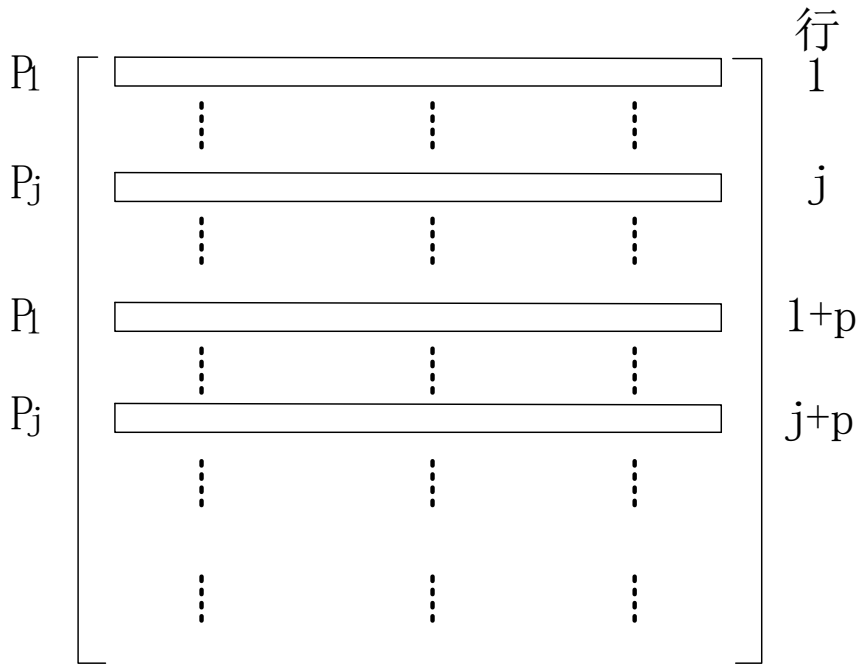
上三角方程组的求解

- 上三角方程组的回代解法并行化

(2)SIMD-CREW上的并行回代算法

- 划分: p个处理器行循环带状划分
- 算法

```
Begin
   for i=n downto 1 do
     x_i=b_i/a_ii
     for all P_j, where 1≤j≤p do
        for k=j to i-1 step p do
           b_k=b_k-a_ki x_i
           a_ki=0
        endfor
     endfor
   endfor
End            // p(n)=n,  t(n)=n
```



第十章 线性方程组的求解

10.1 三角形方程组的求解

10.2 三对角方程组的求解

10.3 稠密线性方程组的求解

10.4 稀疏线性方程组的求解

10.2 三对角方程组的求解

10.2.1 直接求解法

10.2.2 奇偶规约法

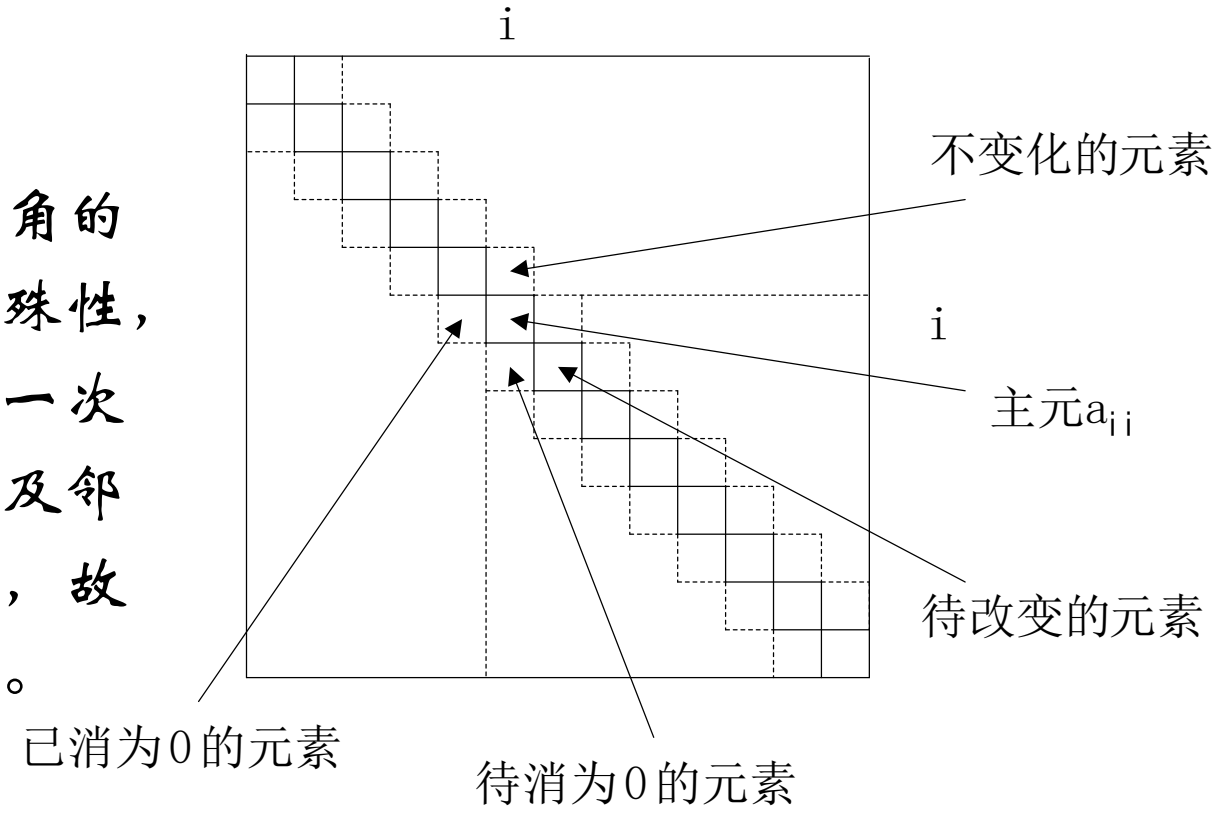
三对角方程组的直接求解法

- Gauss消去法(难以并行化)

  ①消元

  ②回代

注：由于三对角的方程组的特殊性，一次消元或一次回代，只涉及邻近一个方程，故难以并行化。



10.2 三对角方程组的求解

10.2.1 直接求解法

10.2.2 奇偶规约法

三对角方程组的直接求解法

- 奇偶规约求解法(可并行化)

  三对角方程可以写成如下形式

$$f_i x_{i-1} + g_i x_i + h_i x_{i+1} = b_i \qquad i=1\sim n$$

$$f_1 = h_n = 0$$

  - 串行算法描述

①利用上下相邻方程消去偶序号方程中的奇下标变量:

$$f_{2i-1} x_{2i-2} + g_{2i-1} x_{2i-1} + h_{2i-1} x_{2i} = b_{2i-1}$$

$$f_{2i} x_{2i-1} + g_{2i} x_{2i} + h_{2i} x_{2i+1} = b_{2i}$$

$$f_{2i+1} x_{2i} + g_{2i+1} x_{2i+1} + h_{2i+1} x_{2i+2} = b_{2i+1}$$

2i-1方程乘上某个数消去2i方程中的$f_{2i}x_{2i-1}$项，2i+1方程乘上某个数消去2i方程中的$h_{2i}x_{2i+1}$项，使2i方程变为

$$\alpha_i x_{2i-2} + \beta_i x_{2i} + \gamma_i x_{2i+2} = \eta_i \qquad i=1,2,\cdots,n/2$$

三对角方程组的直接求解法

②重复①最终可得:

case 1:

$$g_1x_1+h_1x_2 = b_1$$
$$f_2x_1+g_2x_2+h_2x_3 = b_2$$
$$f_3x_2+g_3x_3+h_3x_4 = b_3$$
$$f_4x_3+g_4x_4 = b_4$$

case 2:

.
.
.
.

可以分别得到

$$g_1x_1+h_1x_2 = b_1$$
$$f_2x_1+g_2x_2 = b_2$$

或

$$g_1x_1+h_1x_2 = b_1$$
$$f_2x_1+g_2x_2+h_2x_3 = b_2$$
$$f_3x_2+g_3x_3 = b_3$$

解得 x_1, x_2 或 x_1, x_2, x_3

③回代求解x

- 并行化分析: ①、②消去奇下标可以并行化;
  ③回代求解可以并行化

第十章 线性方程组的求解

10.1 三角形方程组的求解

10.2 三对角方程组的求解

10.3 稠密线性方程组的求解

10.4 稀疏线性方程组的求解

10.3 稠密线性方程组的求解

10.3.1 有回代的高斯消去法

10.3.2 无回代的高斯-约旦法

10.3.3 迭代求解的高斯-赛德尔法

有回代的高斯消去法

- 算法基本原理
  - 求解过程分为消元和回代两个阶段，消元是将系数矩阵A化为上三角阵T，然后对TX=c进行回代求解。
  - 消元过程中可以应用选主元方法，增加算法的数值稳定性。
  - 下面是消元过程图：

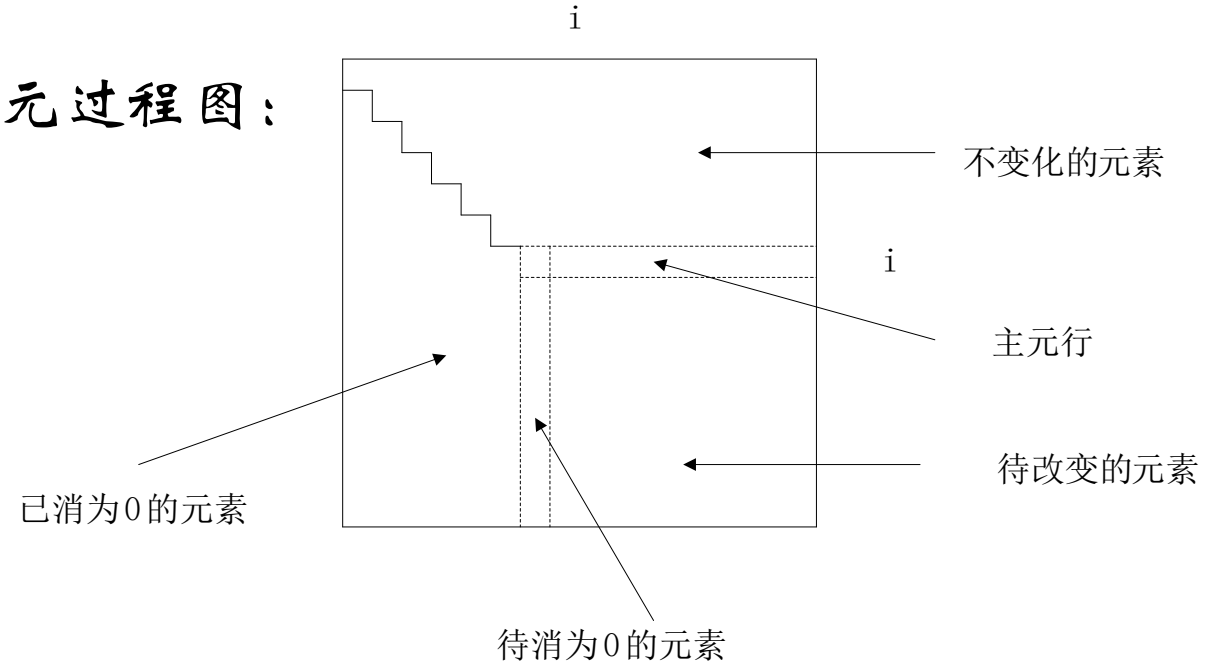


图10.1

有回代的高斯消去法

- 并行化分析
  - 消元和回代均可以并行化；
  - 选主元也可以并行化；
  - 消元过程的并行化图示：处理器按行划分

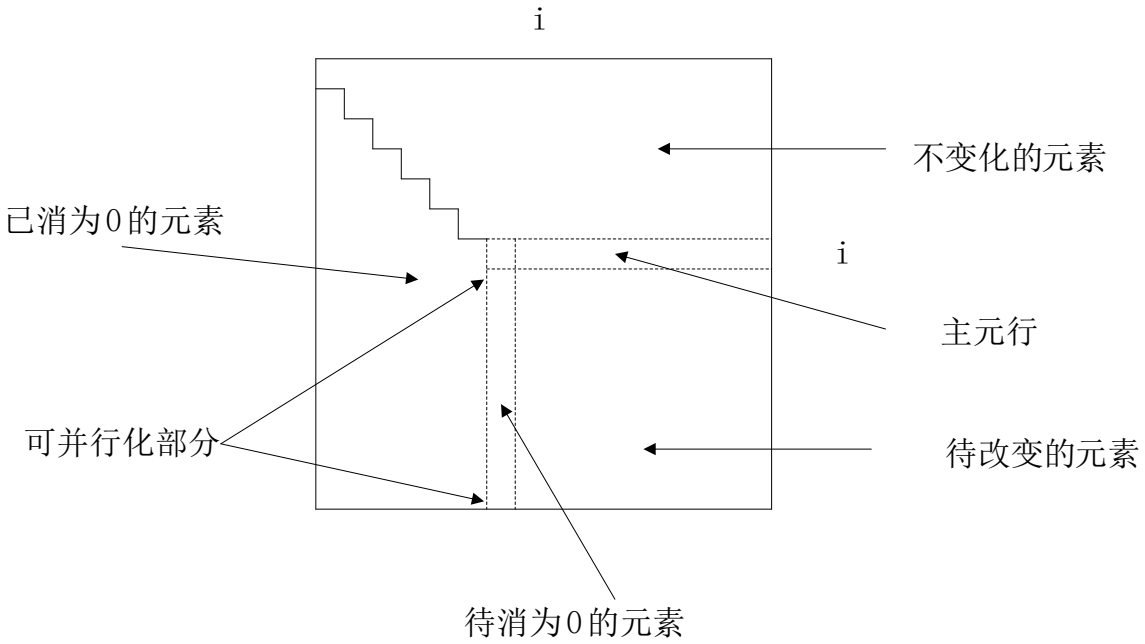


图10.1

10.3 稠密线性方程组的求解

10.3.1 有回代的高斯消去法

10.3.2 无回代的高斯-约旦法

10.3.3 迭代求解的高斯-赛德尔法

无回代的高斯-约旦法

- 串行算法原理

  ①消元：通过初等行变换，将(A,b)化为主对角线矩阵，记b为A的第n+1列

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & a_{1,n+1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & a_{2,n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & a_{n,n+1} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} a'_{11} & & & & a'_{1,n+1} \\ & a'_{22} & & & a'_{2,n+1} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & a'_{nn} & a'_{n,n+1} \end{bmatrix}$$

  ②求解：$x_j = a'_{j,n+1} / a'_{jj}$

无回代的高斯-约旦法

- SIMD-CREW上的并行算法

(1)处理器: n^2+n个处理器, 这些处理器排成$n\times(n+1)$的矩阵,
处理器编号为P_{ik}, $i=1\sim n$, $k=1\sim n+1$

(2)并行化分析

①消元的并行化: // O(n)

for j=1 to n-1, each P_{ik} Par-do //第j次消元

$P_{ij}(i<>j)$: $a_{ij} <— 0$

$P_{ik}(i<>j, k=j+1\sim n+1)$: $a_{ik} <— a_{ik}-a_{jk}(a_{ij}/a_{jj})$

end for

②求解: for each $P_{jj}(j=1\sim n)$ Par-do: $x_j <— a_{j,n+1}/a_{jj}$ //O(1)

(3)时间分析: $t(n)=O(n)$, $p(n)=O(n^2)$, $c(n)=O(n^3)$ 成本最优?

无回代的高斯-约旦法

- 成本最优？

串行算法的最优时间：由于 $x=A^{-1}b$

①$A^{-1}b$(假设已有A^{-1})：$O(n^2)$

②求A^{-1}：$A=\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} I & 0 \\ A_{21}A_{11}^{-1} & I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I \end{bmatrix}$

$$\Rightarrow A^{-1}=\begin{bmatrix} I & -A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & B^{-1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & 0 \\ -A_{21}A_{11}^{-1} & I \end{bmatrix}$$

其中，$B=A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$

∴求A^{-1}需要：2次n/2×n/2矩阵的逆　i(n/2)

6次n/2×n/2矩阵的乘　m(n/2)

2次n/2×n/2矩阵的加　a(n/2)

$i(n)=i(n/2)+6m(n/2)+2a(n/2)$

$a(n/2)=n^2/2$，$m(n/2)=O((n/2)^x)$　$2<x<2.5$

$=>i(n)=O(n^x)$　综上，串行算法的最优时间为$O(n^x)$　$2<x<2.5$

10.3 稠密线性方程组的求解

10.3.1 有回代的高斯消去法

10.3.2 无回代的高斯-约旦法

10.3.3 迭代求解的高斯-赛德尔法

迭代求解的高斯-赛德尔法

- 串行算法原理

$$x_i^{k+1} = -\frac{1}{a_{ii}}\left[\sum_{j<i} a_{ij}x_j^{k+1} + \sum_{j>i} a_{ij}x_j^{k} - b_i\right]$$

如果对某个k, 给定的误差允许值c有

$$\sum_{i=1}^{n}\left|x_i^{k+1} - x_i^{k}\right| < c$$

则认为迭代是收敛的。

- 并行化分析

由于每次迭代需要使用本次迭代的前面部分值，因而难以到同步的并行算法，下面给出一个异步的并行算法

迭代求解的高斯-赛德尔法

- MIMD异步并行算法
  - N个处理器(N≤n)生成n个进程，每个进程计算x的一个分量

Begin

(1)$old_i \leftarrow x_i^0$, $new_i \leftarrow x_i^0$

(2) 生成进程i

(3) 进程i

repeat

(i) $old_i \leftarrow new_i$

(ii)$new_i \leftarrow (b_i - \sum_{k<i} a_{ik} \times old_k - \sum_{k>i} a_{ik} \times old_k)/a_{ii}$

until $\sum_{i=1\sim n} | old_i - new_i | < c$

$x_i \leftarrow new_i$

End

第十章 线性方程组的求解

10.1 三角形方程组的求解

10.2 三对角方程组的求解

10.3 稠密线性方程组的求解

10.4 稀疏线性方程组的求解

10.4 稀疏线性方程组的求解

10.4.1 线性方程组的并行化方法

10.4.2 稀疏线性方程组的迭代解法

10.4.3 高斯-赛德尔迭代法的并行化

线性方程方程的并行化方法

- 线性方程组选择算法的考虑因素
  - 系数矩阵A的结构
    - dense　　Gaussian elimination, etc
    - Sparse　　iterative method
    - triangular　　substitution, odd-even reduction
    - certain PDEs　　multigrid, etc
  - 计算精度要求
    - Gaussian elimination: more accurate, more expensive
    - Conjugate gradients: less accurate, less expensive
  - 计算环境要求
    - architecture, available languages, compiler quality
    - libraries?

线性方程方程的并行化方法

- 求解方法的并行化

(1)直接解法的并行化(用于稠密线性方程组)

- Gauss消去法(包括选主元的Gauss消去法)
- Gauss-Jordan消去法
- LU分解法

(2)迭代法的并行化(用于稠密和稀疏线性方程组)

- Jacobi
- Gauss-Seidel(可异步并行化)
- Jacobi OverRelaxation(JOR)
- Gauss-Seidel OverRelaxation(SOR)
- Conjugate Gradient

10.4 稀疏线性方程组的求解

10.4.1 线性方程组的并行化方法

10.4.2 稀疏线性方程组的迭代解法

10.4.3 高斯-赛德尔迭代法的并行化

稀疏线性方程方程的迭代解法

- 迭代解法

(1) *Jacobi*:
$$x_i^{k+1} = (b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^k) / a_{ii}$$

(2) *Gauss – Seidel*:
$$x_i^{k+1} = (b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^k) / a_{ii}$$

(3) *JOR*:
$$x_i^{k+1} = (1-\omega) x_i^k + \omega (b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^k) / a_{ii}$$

(4) *SOR*:
$$x_i^{k+1} = (1-\omega) x_i^k + \omega (b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^k) / a_{ii}$$

(5) *Conjugate Gradient*

10.4 稀疏线性方程组的求解

10.4.1 线性方程组的并行化方法

10.4.2 稀疏线性方程组的迭代解法

10.4.3 高斯-赛德尔迭代法的并行化

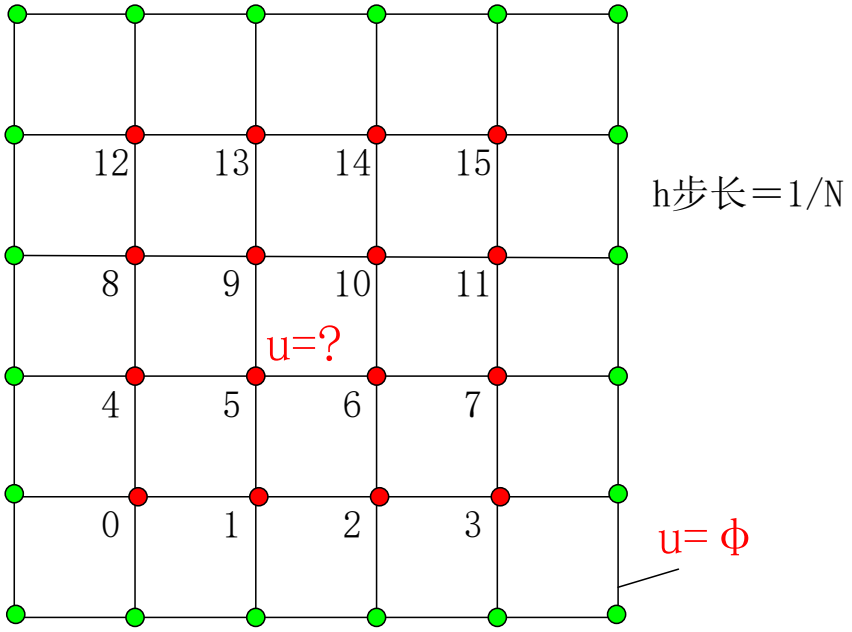
高斯-赛德尔迭代法的并行化

- 由PDE离散产生的稀疏线性方程组

(1)Laplace方程

$$\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2}=g(x,y) \qquad (x,y)\in D=[0,1]\times[0,1]$$

求$u(x,y)$满足上面的方程，且满足边值$\varphi(x,y)$



高斯-赛德尔迭代法的并行化

(2)由五点格式的离散化(假设g(x,y)=0)

记 $u_{ij} = u(\frac{i}{N}, \frac{i}{N}), \quad 0 \le i, j \le N$

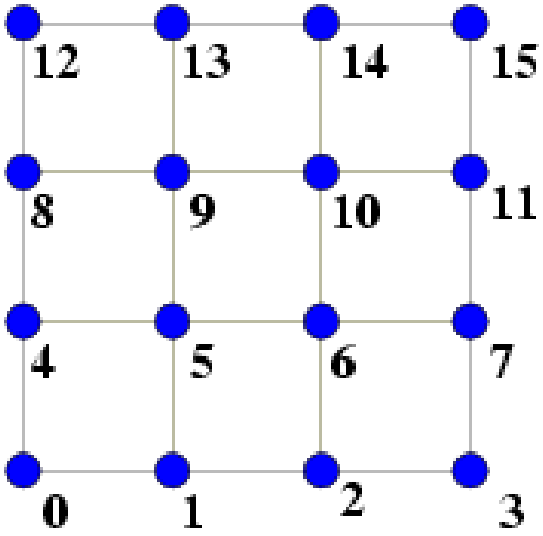
用二阶中心差分逼近：
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{1}{h^2}[u(x+h,y) - 2u(x,y) + u(x-h,y)]$$
$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{1}{h^2}[u(x,y+h) - 2u(x,y) + u(x,y-h)]$$

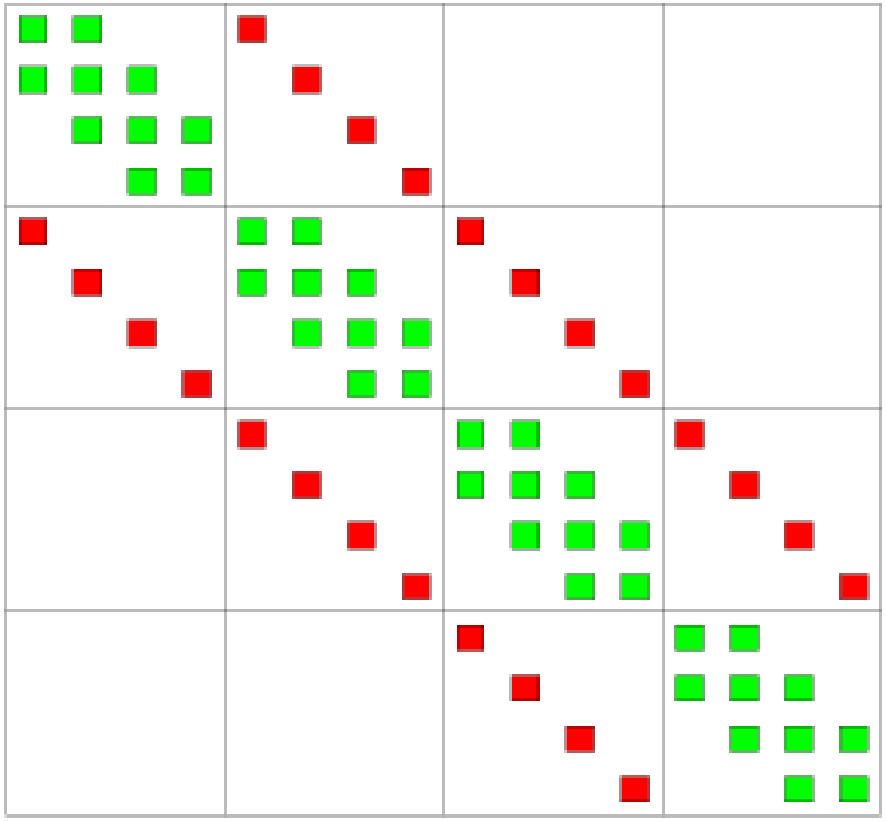
代入Laplace方程 $\Rightarrow$
$$u_{ij} = \frac{1}{4}[u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}] \qquad 0 < i, j < N$$

$$\Rightarrow A = \begin{bmatrix} R & E & & & \\ E & R & E & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & E & R & E \\ & & & E & R \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} -4 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -4 & 1 \\ & & & 1 & -4 \end{bmatrix}, \quad E\text{为单位阵}$$

高斯-赛德尔迭代法的并行化

A为稀疏的块三对角矩阵

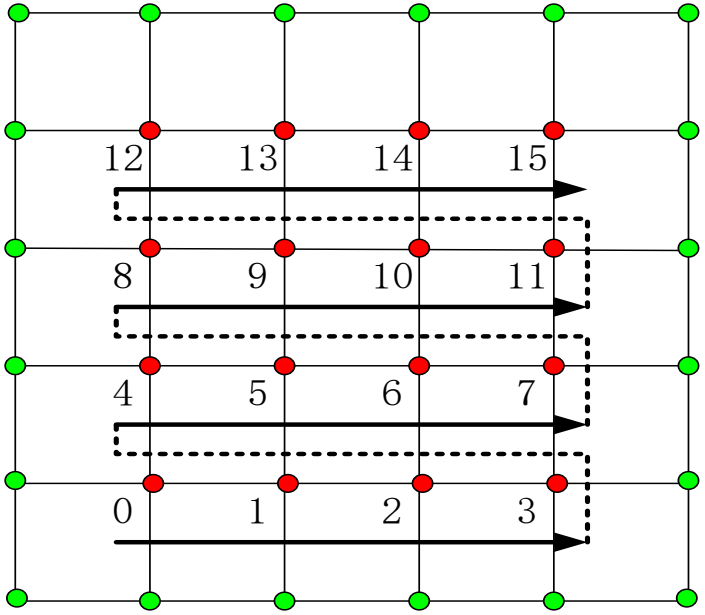




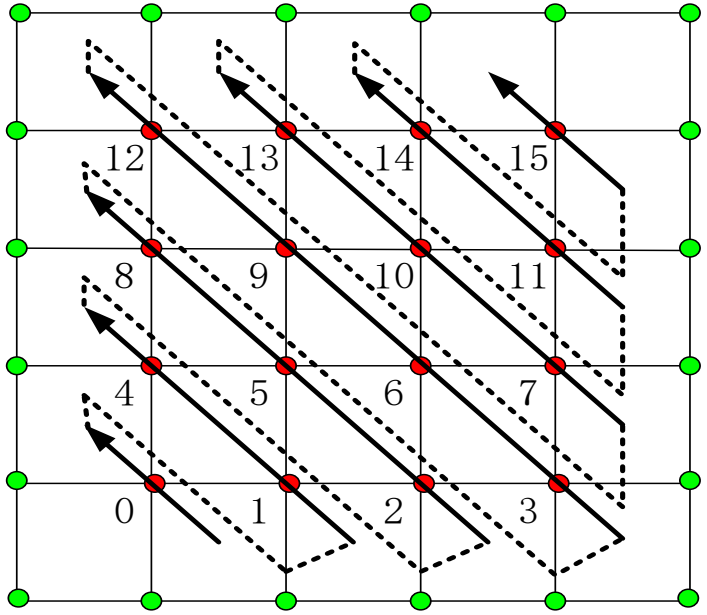
高斯-赛德尔迭代法的并行化

- Gauss-Seidel迭代解法的并行化

(1)两种串行算法的计算顺序及其并行化



顺序1

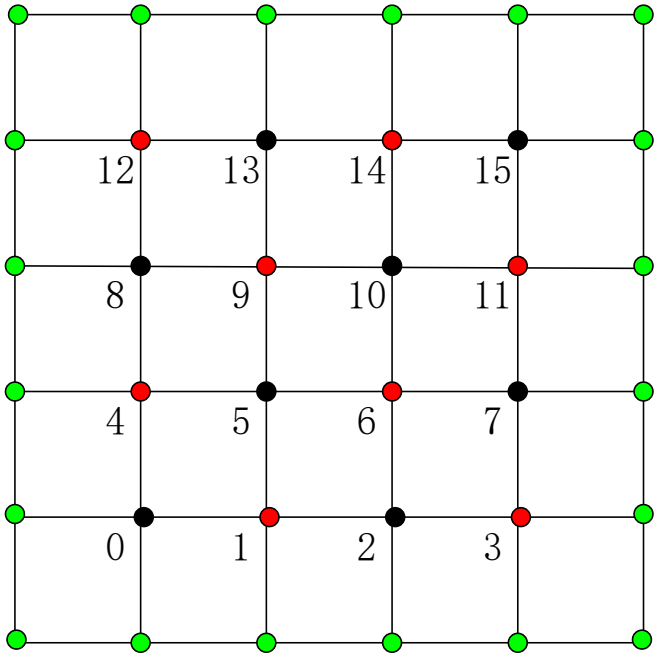


顺序2

注：顺序1难以并行化；顺序2可以小规模并行化

高斯-赛德尔迭代法的并行化

(2) 红黑着色并行算法



①并行计算所有的红点

②并行计算所有的黑点

③重复①、②直至满足精度要求