МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»
(ННГУ)

Институт информационных технологий, математики и механики

Кафедра математического обеспечения и суперкомпьютерных технологий

Направление подготовки: «Прикладная математика и информатика»
Профиль подготовки: «Вычислительная математика и суперкомпьютерные технологии»

Отчет по лабораторной работе №2

«Метод сопряженных градиентов для решения СЛАУ с разреженной матрицей»

Выполнил: студент группы 381903-3м
_____ Панов А.А.
Подпись

Проверил:
к.ф.-м. н., доц., доцент каф. МОСТ
_____ Баркалов К.А.
Подпись

Нижний Новгород
2020

Содержание

Введение

Для решения некоторых задач необходимы решать системы Ax = b, где A разреженная матрицы (значительная часть элементов этой матрицы равны нулю, количество ненулевых элементов в таком случае обычно пропорционально O(n), где n – размер матрицы). Для хранения разреженных матриц используют специальные форматы хранения (позволяющих не хранить нулевые элементы матрицы) и специальные алгоритмы. В данной лабораторной будет рассмотрен один из форматов хранения разреженных матриц (сжатое хранение строкой CSR - compressed sparse row, CRS - compressed row storage) и один из алгоритмов решения СЛАУ (метод сопряженных градиентов).

1. Постановка задачи

Реализовать метод сопряженных градиентов для решения СЛАУ с разреженной матрицей, используя технологию OpenMP: Ax = b, где A – разреженная квадратная симметричная положительно определённая матрица, x, b – плотные векторы.

Программа на языке C++ должна реализовывать функцию со следующим заголовком:

```
void SLE_Solver_CRS(CRSMatrix & A, double * b, double eps, int
                    max_iter, double * x, int & count);
struct CRSMatrix
{
 int n; // Число строк в матрице
 int m; // Число столбцов в матрице
 int nz; // Число ненулевых элементов в разреженной симметричной
           матрице, лежащих не ниже главной диагонали
 vector<double> val; // Массив значений матрицы по строкам
 vector<int> colIndex; // Массив номеров столбцов
 vector<int> rowPtr; // Массив индексов начала строк
};
```

Функция получает в аргументах следующие переменные:
A – указатель на структуру CRSMatrix, в которой хранится симметричная матрица A размера n×n в симметричном CRS формате (хранятся только элементы не ниже главной диагонали)
b – указатель на массив, в котором по строкам хранится столбец b размера n×1
eps – критерий остановки:

$$\frac{\|x_k - x_{k+1}\|_2}{\|b\|_2} < \mathbf{eps}$$

max_iter – критерий остановки: число итераций больше max_iter
count – число выполненных итераций алгоритмом.

Ответ считается корректным, если:

$$\frac{\|Ax - b\|_2}{\|A\|_2} < 10^{-8}$$

Размерность матрицы $n \le 100000$, число ненулевых элементов $nz \le 10^7$.

2. Разреженные матрицы

Обычно матрицу размера NxN называют разреженной, если количество её ненулевых элементов O(N). Но классификации матрицы в первую очередь зависит от её реализации. Например, трех диагональная матрица имеет всего 3N элементов, но для нее выгодней использовать собственную структуру данных, а не одно из представлений разряженной матрицы. Если же матрицы не имеет четкой структуры, то для нее имеет смысл использовать одно из представлений разреженной матрицы.

2.1 CRS. Сжатое хранение строкой

Разреженная матрица A размера n на n, с nz ненулевыми элементами хранится в трех массивах:

1. Массив val – «построчно» хранит значения ненулевых элементов, размер массива nz.
2. Массив colIndexes – хранит номера столбцов для каждого элемента, размер массива nz.
3. Массив rowPtr – хранит индексы, указывающие с какого элемента в массиве val начинается каждая строка. Например, в матрице нулевая строка «пустая», а в первой строке есть 3 ненулевых элемента. Тогда первые три элемента массива row равны 0; 0; 3. Размер массива n + 1, первый элемент всегда равен 0, последний равен nz.

2.2 Умножение разреженной матрицы в формате CRS на плотный вектор

Данная операция понадобится в дальнейшем при реализации метода сопряженных градиентов.

Рассмотрим умножение разреженной матрицы A размера n на n, с nz ненулевыми элементами, в формате CRS, на плотный вектор b длины n.

```
void mul(const double* vec, double* res) const
    {
        int curIndx = 0;
        for (int i = 0; i < n; i++)
        {
            const int rowElements = rowPtr[i + 1] - rowPtr[i];
            const int endRow = curIndx + rowElements;
            for (curIndx; curIndx < endRow; curIndx++)
            {
                const int j = colIndex[curIndx];
                const double vv = val[curIndx];
                res[i] += vv * vec[j];
            }
        }
        return res;
     }
```

2.2.1 Особенности умножения для симметричной матрицы в формате CRS

Если разреженная матрицы A размера n на n, с nz ненулевыми элементами, является симметричной, то появляется возможность хранить в два раза меньше элементов. Но появляется проблема корректного умножения такой матрицы на вектор. Существует несколько способов корректно выполнить умножение:

1. Дополнить «половину» симметричной матрицы до полного представления. Данный способ требует выделения дополнительной памяти. В итоге матрица будет занимать (2*nz+n)*sizeof(elementOfMatrix) байт.

2. Создать транспонированную копию «половинки» симметричной матрицы без главной диагонали. Умножить вектор на транспонированную копию, умножить вектор на оригинал, результаты умножений сложить. Данный способ требует выделения дополнительной памяти. В итоге две половинки матрицы будут занимать (2*nz + n)*sizeof(elementOfMatrix) байт.

3. Выполнить корректное умножение «половинки» матрицы на вектор можно добавив к последовательной версии после строки res[i] += vv * vec[j]; следующий код:

```
if (j != i)
    res[j] += vv * vec[i]
```

Данный способ не требует выделения дополнительной памяти (в последовательной версии).

2.2.2 Особенности умножения для параллельной версии

При распараллеливании внешнего цикла (по i) возможна ситуация, когда несколько потоков одновременно обратятся к res[j] и некорректно выполнят сложение. Чтобы этого избежать достаточно в каждом потоке выделить дополнительный массив tmp длины n и выполнять сложение по j в него. После того, как внешний цикл будет выполнен, нужно прибавить к res элементы из вспомогательных массивов tmp. Данная реализация потребует выделения дополнительной памяти в размере n*число потоков.

```
void mul(const double* vec, double* res, double* t) const
{
        const int numThreads = omp_get_max_threads();
        #pragma omp parallel
        {
            const int indxThread = omp_get_thread_num();
            const int size = n / numThreads;
            const int start = indxThread * size;
            int ostatok = 0;
            if (indxThread == numThreads - 1)
                ostatok = n % numThreads;
            const int end = start + size + ostatok;
            double *tmp = t + indxThread * n;
            int elIndx = rowPtr[start];
            for (int i = start; i < end; i++)
            {
                const int endRow = elIndx + (rowPtr[i + 1] - rowPtr[i]);
                res[i] = 0.0;
                for (elIndx; elIndx < endRow; elIndx++)
                {
                    const int j = colIndexes[elIndx];
                    const double vv = val[elIndx];
                    res[i] += vv * vec[j];
                    if (j != i)
                        tmp[j] += vv * vec[i];
                }
            }
        }
        //редукция в res[i]
        for (int thr = numThreads - 1; thr >= 0; thr--)
        {
            double *tmp = t + thr * n;
            #pragma omp parallel for
            #pragma ivdep
            for (int i = 0; i < n; i++)
            {
                res[i] += tmp[i];
                tmp[i] = 0.0;
            }
        }
    }
};
```

3. Метод сопряженных градиентов

Идея метода сопряженных градиентов: решение системы линейных уравнений: Ax = b, где A – SPD (симметричная, положительно определенная), эквивалентно решению задачи минимизации функции.

$$F(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$$

Минимум находится из условия:

$$\nabla F(x) = Ax - b = 0$$

Предварительный шаг: вычисляются начальный вектор невязки r_0 и вектор направления p_0:

$$r_0 = p_0 = b - Ax_0$$

Основные шаги:

for i=0,…, n do

$$\alpha_i = \frac{(r_i, r_i)}{(Ap_i, p_i)}$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$$

$$r_{i+1} = r_i - \alpha_i A p_i$$

$$\beta_i = \frac{(r_{i+1}, r_{i+1})}{(r_i, r_i)}$$

$$p_{i+1} = r_{i+1} + \beta_i p_i$$

За критерий «досрочной» остановки можно принять условие:

$$\frac{||x_i - x_{i+1}||_2}{||b||_2} < eps$$

3.1 Реализация

Самая трудоемкая операция в методе сопряженных градиентов это скалярное умножение. Его реализация для разреженных матриц описана выше. Остальные этапы алгоритма несложно реализовать. Для удобства поверх структуры CRSMatrix была добавлена структура SLECRSMatrix.

3.2 Структуры данных

```
struct SLECRSMatrix
{
    const int &n; // Число строк в матрице
    const int &m; // Число столбцов в матрице
    const int &nz; // Число ненулевых элементов в разреженной симметричной матрице, лежащих не ниже главной диагонали
    const vector<double> &val; // Массив значений матрицы по строкам
    const vector<int> &colIndexes; // Массив номеров столбцов
    const vector<int> &rowPtr; // Массив индексов начала строк
    SLECRSMatrix(const CRSMatrix &matr);
    void mul(const double* vec, double* res, double* t) const
}
```

Код функции mul приведен выше.

3.3 Основной алгоритм

Основной этап выглядит довольно просто в соответствии с формулами метода сопряженных градиентов.

```
    for (count = 0; count < max_iter; count++)
    {
        // alpha_i
        mA.mul(&p[0], &Ap[0], &tmp[0]);
        alpha = scalar(&r0[0], &r0[0], n) / scalar(&Ap[0], &p[0], n);

        // копируем в x0 "предыдущий" ответ
        // x_i = x_i+1
        copy_ar(&x[0], &x0[0], n);

        // x_i+1 = …
        addVector(&x[0], &p[0], alpha, &x[0], n);

        // r_i+1 = …
        subtractVector(&r0[0], &Ap[0], alpha, &r1[0], n);

        // beta_i = …
        beta = scalar(&r1[0], &r1[0], n) / scalar(&r0[0], &r0[0], n);

        // p_i+1 = …
        addVector(&r1[0], &p[0], beta, &p[0], n);

        // r_0 = r_i
        copy_ar(&r1[0], &r0[0], n);

        double error = gerError(&x0[0], x, b, n);
        if (error < eps)
        {
            count++;
            return;
        }
    }
```

4. Вычислительные эксперименты

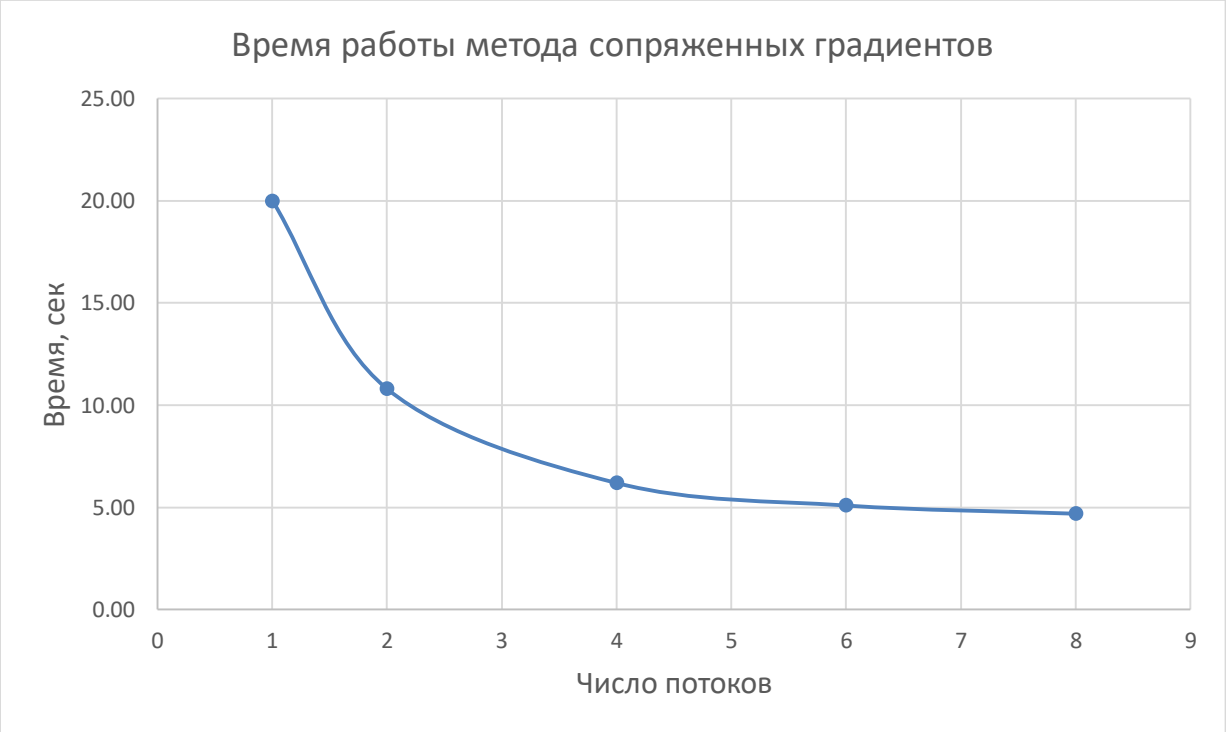
Метод сопряженных градиентов выполнялся для симметричной, положительно определенной пяти диагональной матрицы A размера $n * n$ (итого $5n$ ненулевых элементов). Так как матрица симметричная хранились только элементы не ниже главной диагонали. Благодаря использованию формата CRS всего хранилось 3n+3n+n=7n элементов. Для проверки корректности выполнялось вычисление невязки (Ax-b).

Запуск производился на восьми ядерном процессоре Intel core i7 9700K, 16 gb ОЗУ. Использовался Intel® C++ Compiler 19.0 for Windows* с оптимизацией O2.

Размер пяти диагональной матрицы n=18000, число итераций 80000.

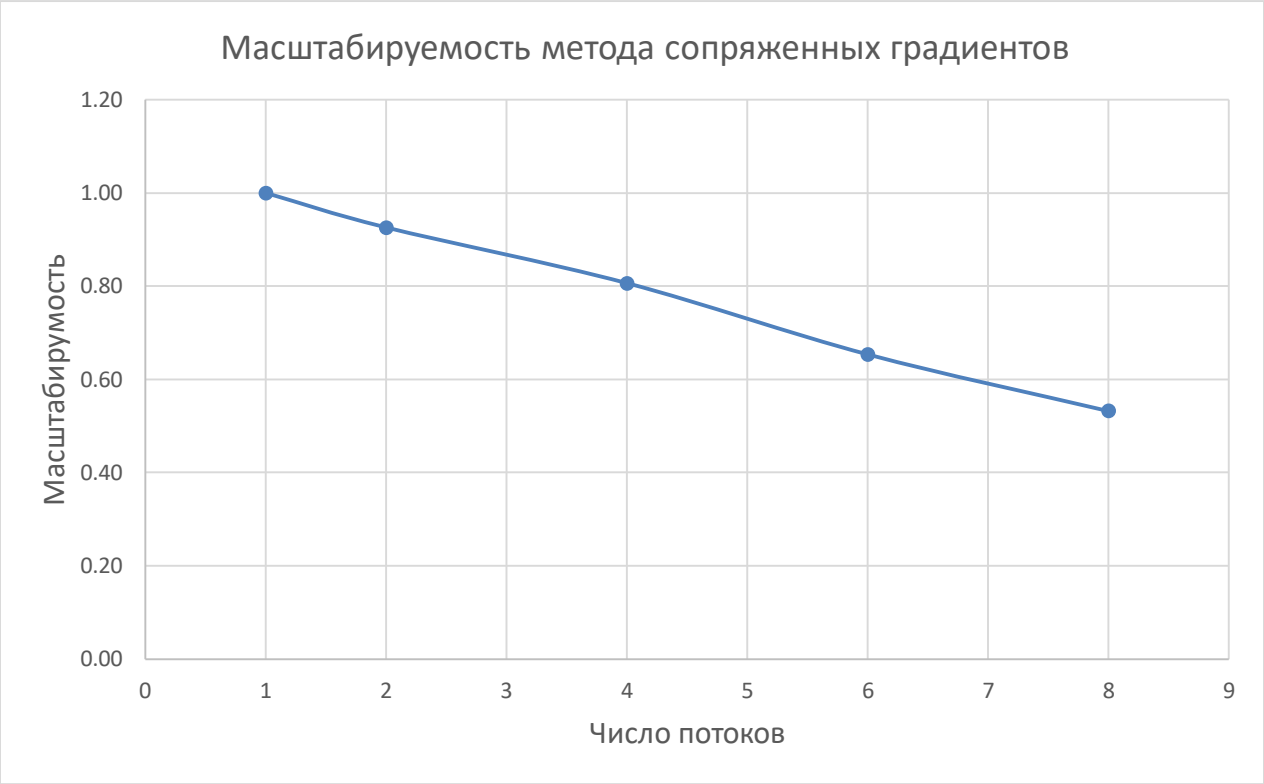
Время, сек.	1 core	2 core	4 core	6 core	8 core
n = 18000 num_it=80000	20	10.8	6.2	5.1	4.7

Таблица 1. Время работы метода сопряженных градиентов.



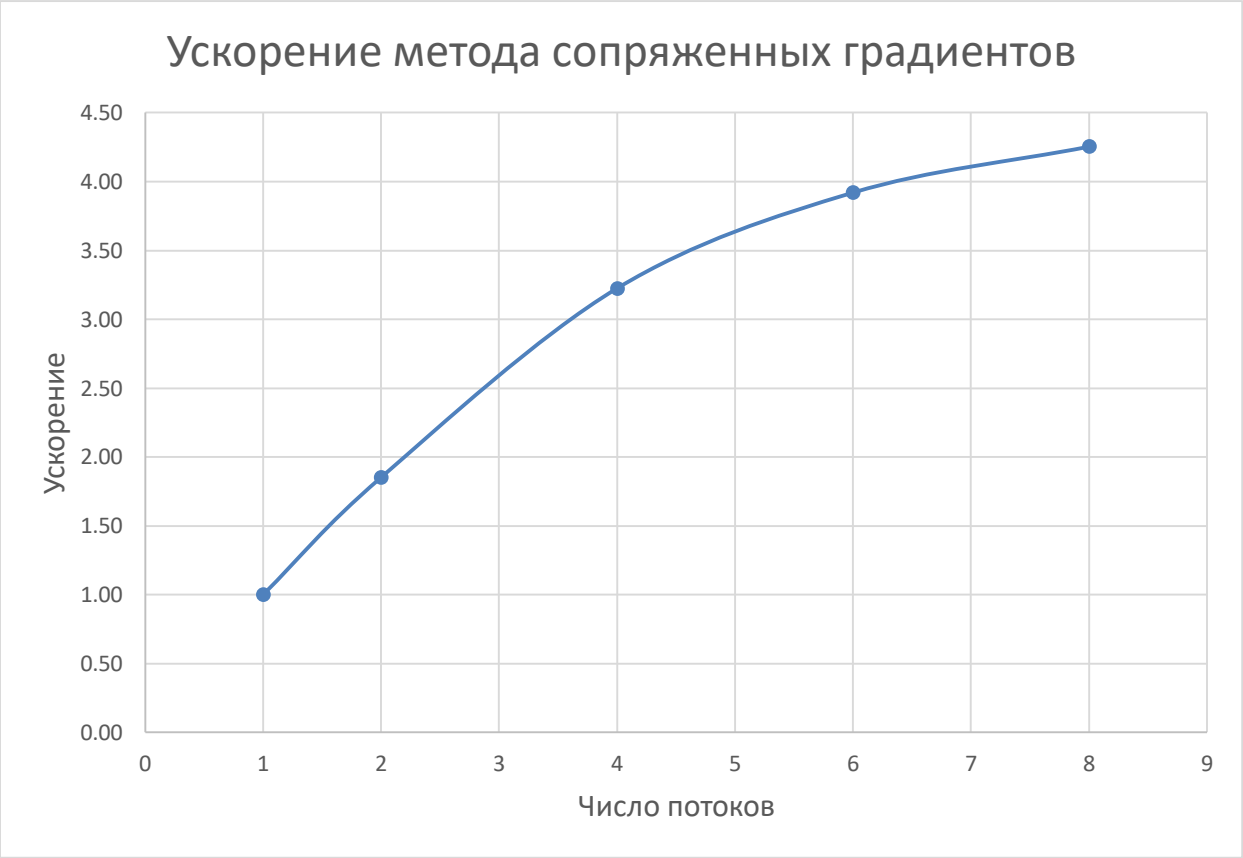
Время, сек.	1 core	2 core	4 core	6 core	8 core
n = 18000 num_it=80000	1	0,93	0,81	0,65	0,53

Таблица 2. Масштабируемость метода сопряженных градиентов.



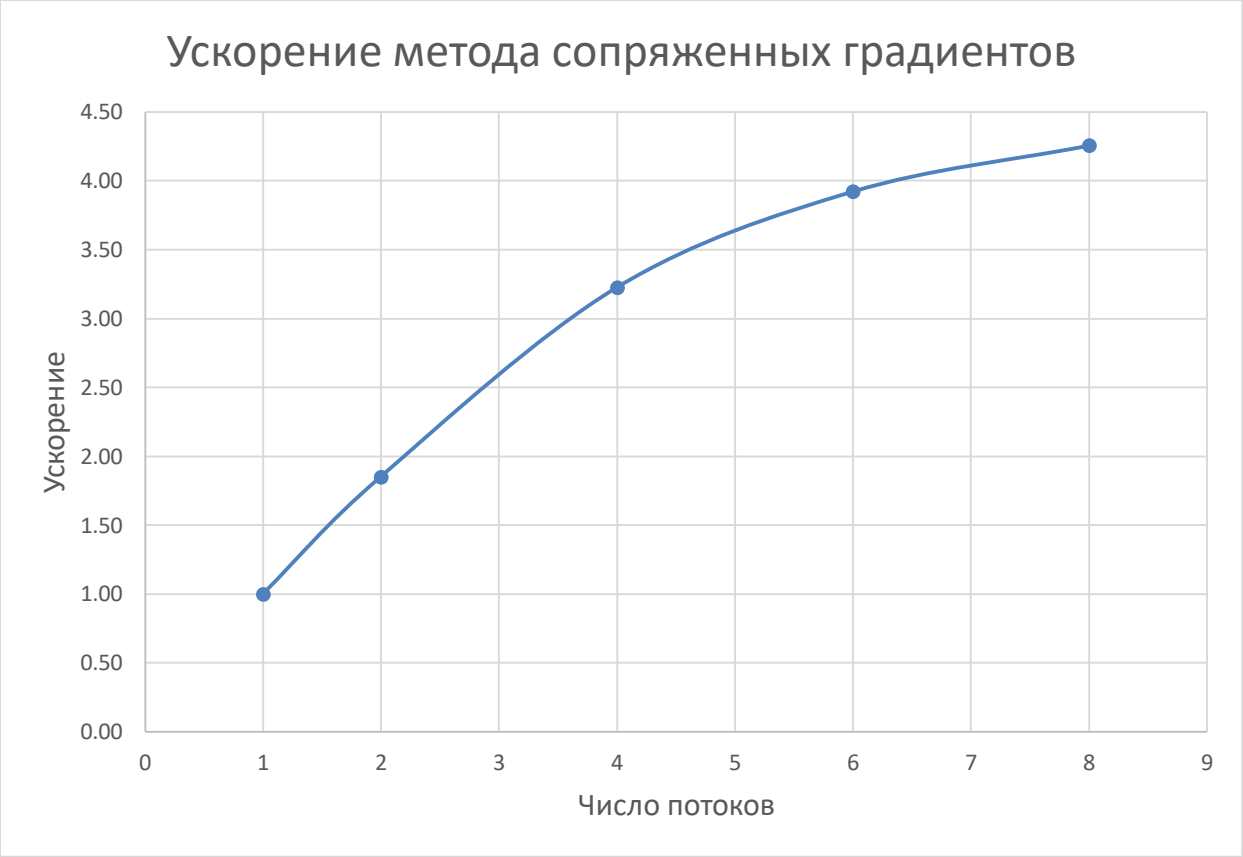
Время, сек.	1 core	2 core	4 core	6 core	8 core
n = 18000 num_it=80000	1	1,85	3,23	3,92	4,26

Таблица 3. Ускорение метода сопряженных градиентов.



5. Заключение

Численный эксперимент показал, что на 4 ядрах алгоритм имеет неплохую масштабируемость в 81%. При увеличении числа ядер ускорение продолжает расти (4.26 на 8 ядрах), но масштабируемость падает до 53%. В целом, распараллеливание алгоритма сопряженных градиентов может принести значительное ускорение.



Список литературы

1. Баркалов К.А. Параллельные численные методы.
2. Самарский А. А. Введение в численные методы. – Лань, 2009.