计算机学院

并行程序设计

Gröbner 基计算中的高斯消元并行化改进

小组成员姓名：丁屹、卢麒萱

小组成员学号：2013280、2010519

专业：计算机科学与技术

2022 年 4 月 5 日

目录

1 研究问题

1.1 高斯消元法

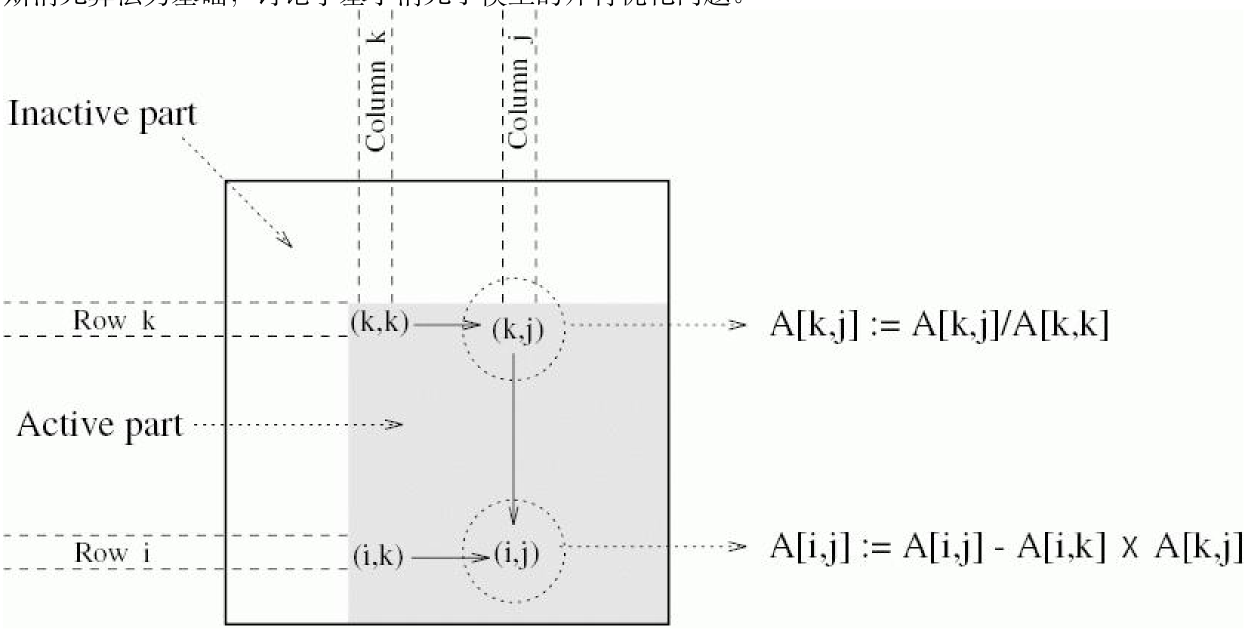
数学上，高斯消元法（高斯消去法）是一种用于求解线性方程式的算法。但是它的运算非常繁琐，不能用于求解矩阵的秩，也不能得到逆矩阵的逆矩阵。但是，当方程式超过一百万条时，这种方法就非常节省时间了。对于某些大型方程，一般采用迭代法和花式消元方法求解。高斯消元法在求解矩阵时，会形成“行梯阵式”。高斯消元法是一种求解数以千计的方程和未知数的方法。对于某些特殊的系数，也有特殊的求解方法。

高斯消元法的运算复杂度为 $O(n^3)$；即，若系数矩阵为 $n*n$，则高斯消元法所需的计算量约为 n^3。

高斯消元法可以用于任何域。

高斯消元法在某些矩阵中具有较好的稳定性。高斯消元法在一般情况下也是适用的，但也有一些特殊情况。

由于多核处理器的应用越来越广泛，目前可以采用线性高斯消元算法来加快运算速度。本论文还以高斯消元算法为基础，讨论了基于消元子模型的并行优化问题。



Algorithm 1 普通高斯消元算法伪代码

function LU
  for $k := 0$ **to** n **do**
    for $j := k+1$ **to** n **do**
      $A[k,j] := A[k,j]/A[k,k]$
    end for
    $A[k,k] := 1.0$
    for $i := k+1$ **to** n **do**
      for $j := k+1$ **to** n **do**
        $A[i,j] := A[i,j] - A[i,k] * A[k,j]$
      end for
      $A[i,k] := 0$
    end for

13: **end for**
14: **end function**

观察高斯消去算法，注意到伪代码第 4，5 行第一个内嵌循环中的 A[k, j] := A[k, j] / A[k, k] 以及伪代码第 8、9、10 行双层 for 循环中的 A[i, j] := A[i, j] - A[i, k] * A[k, j] 都是可以进行向量化的循环。可以通过 SIMD 扩展指令对这两步进行并行优化。

1.2 消元子模式的高斯消元算法

本算法源自布尔 Gröbner 基计算。Gröbner 基是一种广泛应用于复杂高次方程体系的计算方法，它是 Buchberger 首先提出的。它的实质是从多项式环的任何一个理想的生成元上，对一组“好的”生成元进行描述和计算，从而对理想的构造进行分析，并对其进行一些理想的运算。由于数学、科学和工程学中的许多问题都可以用多元多项式方程组表示 (例如, 理想, 模块和矩阵),Gröbner 基的代数算法在理论物理学、应用科学和工程学中具有广泛的应用。在 HFE80 的 Gröbner 基计算过程中，高斯消元时间占比可以达到 90% 以上。考虑到此算法中高斯消元的特殊性，为加快高斯消元速度，设计此算法。

1.2.1 符号说明

R: 所有消元子构成的集合

$R[i]$：首项为 i 的消元子

E：所有被消元行构成的数组

$E[i]$：第 i 个被消元行

$lp(E[i])$：被消元行第 i 行的首项

这里首项的含义：首项是指某行下标最大的非零项的下标，如某行为 011000，从左到右下标分别为 5,4,3,2,1,0，那么首项为 4，因为该行非零项下标为 3,4，其中最大值为 4。

1.2.2 算法伪代码

Algorithm 2 串行算法伪代码

function GAUSS
  for $i := 0$ **to** $m-1$ **do**
    while $E[i]! = 0$ **do**
      if $R[lp(E[i])]! = NULL$ **then**
        $E[i] := E[i] - R[lp(E[i])]$
      else
        $R[lp(E[i])] := E[i]$
        break
      end if
    end while
  end for
  return E
end function

在这里，最外层循环代表了对每一个被消元的行的遍历。内层循环代表每一条被消元行，若行没有被消为 0，则按照其第一项选择消元；如果有适当的消元符，则用该消元子消元，或者将该被消元行作为消元子，参加下一步的高斯消元。并行算法内容由串行算法改进。

2 背景知识

2.1 数据结构

可采用位向量方式存储每个消元子和被消元行，优点是消元操作变为位向量异或操作，算法实现简单，且适合并行化，易达到更高的并行效率，缺点是 Gröbner 基计算中产生的消元子和被消元行非常稀疏，非零元素（1 元素）在 5 % 以下，位向量存储和计算可能并非最优。也可采用类似倒排链表的存储及方式——可认为是稀疏 0 / 1 矩阵的紧凑存储方式，每个消元子和被消元行只保存 1 元素的位置，且按升序排列，从而类似倒排链表数据结构。优点是存储空间占用更少，缺点是算法设计更复杂，并行化难度高。

2.2 数据访问

矩阵规模可能非常庞大，达到数百万行 / 列，难以全部放入内存。此时，需要设计的是外存算法，考虑如何分批次将数据读入内存进行处理，同时又保证正确性。对外存算法，算法分析和时间测试除了考虑计算之外，还要考虑 I / O 时间。

2.3 并行化方法

1. 对位向量存储方式，两行间消元操作的并行化很直接，无论 SIMD、多线程还是 MPI、GPU，将向量拆分，子向量的异或即自然形成任务，可分配给不同的计算单元。当矩阵规模大到百万级别时，采取这种并行方式就够了。但当矩阵规模没有那么大时，一个消元操作计算量不足以支撑较大规模并行，就需要考虑消元操作间的并行，设计适合的并行任务划分，在提高并发度的同时保证正确性。

2. 对类倒排链表存储方式，可以考虑循环展开和多线程优化。

3. 当矩阵规模非常庞大，需使用外存算法时就要同时考虑计算和访存。多线程并行化时可考虑计算和访存异步模式，在前台线程进行消元计算时、后台线程读取下一步要处理的数据，这需要仔细设计计算和 I / O 步骤，降低依赖关系，以便实现异步模式。

3 研究计划

本课题的研究由丁屹和卢麒萱共同完成，具体两人的分工如下：

- 丁屹负责尝试将高斯消元算法在 arm 平台使用 SIMD、Pthread、OpenMPI 等框架加速，使用 NVIDIA 的 CUDA 框架加速，在各个平台运行测试并对结果进行性能分析对比。

- 卢麒萱负责在本机 (Arch Linux x86) 平台实现普通的和特殊的串行高斯消元算法，使用 SIMD、Pthread、OpenMPI 等框架加速并提前测试，并编写测试代码、尝试结合多种加速方法。

4 参考文献

[1][2]

参考文献

[1] 牟晨琪. 计算机代数. http://cmou.net/files/PolyAlg2-2020.pdf, 2020.

[2] 狄鹏. Grobner 基生成算法的并行. https://www.academia.edu/18478407/Grobner%E5%9F%BA%E7%94%9F%E6%88%90%E7%AE%97%E6%B3%95%E7%9A%84%E5%B9%B6%E8%A1%8C, 2008.