Нижегородский государственный университет
им. Н.И.Лобачевского

Факультет Вычислительной математики и кибернетики

Параллельные численные методы

Метод редукции

При поддержке компании Intel

Баркалов К.А.,
Кафедра математического обеспечения ЭВМ

Содержание

- Постановка задачи
- Ленточные матрицы
- Метод редукции
- Распараллеливание метода редукции
- Оценки эффективности
- Результаты экспериментов

Постановка задачи

- Рассмотрим систему из n линейных алгебраических уравнений вида

$$
\begin{array}{llll}
a_{11}x_1 & +a_{12}x_2 & +\ldots+a_{1n}x_n & =b_1 \\
a_{21}x_1 & +a_{21}x_2 & +\ldots+a_{2n}x_n & =b_2 \\
\ldots & & & \\
a_{n1}x_1 & +a_{n2}x_2 & +\ldots+a_{nn}x_n & =b_n
\end{array}
$$

- В матричном виде система может быть представлена как

$$Ax=b$$

- $A=(a_{ij})$ есть вещественная матрица размера $n\times n$; b и x – вектора из n элементов.
- Будем искать значения вектора неизвестных x, при которых выполняются все уравнения системы.

Ленточные матрицы

- Матрица A называется *ленточной*, когда все ее ненулевые элементы находятся вблизи главной диагонали, т.е.

$$a_{ij}=0, \text{ если } j > i + k_1,\ i > j + k_2, \text{ где } k_1, k_2 < n.$$

  Числа k_1 и k_2 называют шириной верхней и нижней полуленты. Тогда $k_1 + k_2 + 1$ – ширина ленты матрицы.
- Важным классом являются трехдиагональные матрицы (при $k_1 = k_2 = 1$).
- Подобные системы уравнений возникают в задаче сплайн-интерполяции, при решении дифференциальных уравнений.
- Для решения задач с трехдиагональными матрицами существуют специальные методы.

Трехдиагональные матрицы

a1	c1											f1
b2	a2	c2										f2
	b3	a3	c3									f3
		b4	a4	c4								f4
			b5	a5	c5							f5
				b6	a6	c6						f6
					b7	a7	c7					f7
						b8	a8	c8				f8
							b9	a9	c9			f9
								b10	a10	c10		f10
									b11	a11	c11	f11
										b12	a12	f12

Метод редукции

- В некоторых случаях метод прогонки может давать большую погрешность.
- Потенциальным источником погрешности являются формулы для вычисления «прогоночных» коэффициентов, которые содержат операцию деления на разность близких по значению величин.
- *Метод редукции*
  - свободен от указанного недостатка;
  - при одинаковой теоретической трудоемкости показывает бОльшую эффективность.
- Недостаток метода редукции: применим для матриц размера, равного степени двойки;
- Существует обобщение метода редукции на случай блочных трехдиагональных матриц. Число блоков должно быть равно степени двойки, деление заменяется на умножение на обратную матрицу, что подразумевает хорошую обратимость блоков матрицы *A*.

Метод редукции

- Рассмотрим трехдиагональную систему в виде

$$a_i x_{i-1} + c_i x_i + b_i x_{i+1} = f_i \quad , 1 \le i \le n-1,\ x_0=0,\ x_n=0$$

- Идея метода редукции состоит в последовательном исключении из системы неизвестных сначала с нечетными номерами, затем с номерами, кратными 2 (но не кратными 4), и т.д., (*прямой ход*) и восстановлении значений нечетных переменных на основании известных значений переменных с четными номерами (*обратный ход*).

Метод редукции (прямой ход)

- Выпишем три идущие подряд уравнения системы (3.35) с номерами *i* –1, *i*, *i*+1, где *i* – четное число

$$a_{i-1}x_{i-2} + c_{i-1}x_{i-1} + b_{i-1}x_i = f_{i-1}$$
$$a_i x_{i-1} + c_i x_i + b_i x_{i+1} = f_i$$
$$a_{i+1}x_i + c_{i+1}x_{i+1} + b_{i+1}x_{i+2} = f_{i+1}$$

- Умножим первое на $\alpha_i^{(1)} = -a_i / c_{i-1}$, последнее – на $\beta_i^{(1)} = -b_i / c_{i+1}$ и сложим со вторым, получим

$$a_i^{(1)} x_{i-2} + c_i^{(1)} x_i + b_i^{(1)} x_{i+2} = f_i^{(1)}$$, i=2, 4, 6, …, n–2

- где $a_i^{(1)} = \alpha_i^{(1)} a_{i-1}$, $b_i^{(1)} = \beta_i^{(1)} b_{i+1}$, $c_i^{(1)} = \alpha_i^{(1)} b_{i-1} + c_i + \beta_i^{(1)} a_{i+1}$

$$f_i^{(1)} = \alpha_i^{(1)} f_{i-1} + f_i + \beta_i^{(1)} f_{i+1}$$

Метод редукции (прямой ход)

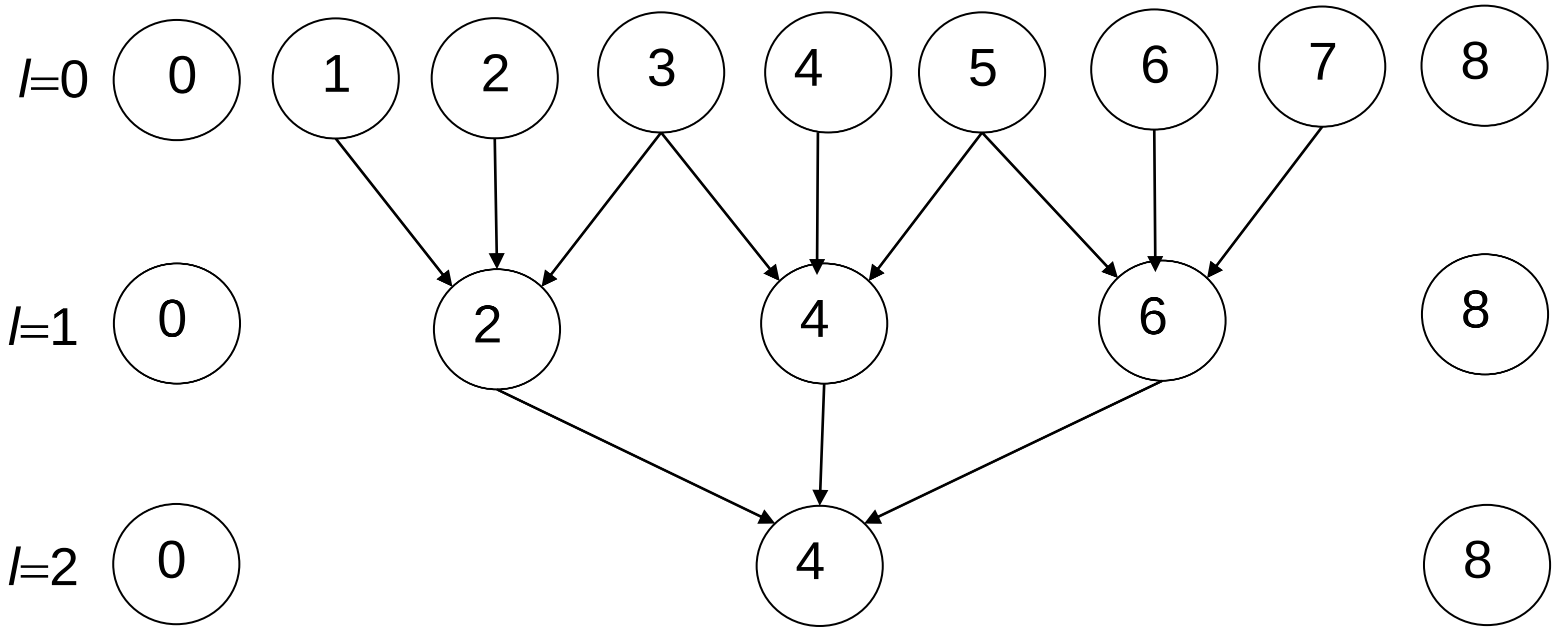
- Если предположить, что неизвестные с четными номерами найдены, то остальные неизвестные с нечетными номерами можно найти как

$$x_i = \frac{f_i - a_i x_{x-1} - b_i x_{i+1}}{c_i}, \ i=1,\ 3,\ 5,\ \ldots,\ n-1.$$

- Систему относительно «четных» неизвестных можно решить, используя описанный процесс рекурсивно (число переменных в ней будет 2^{n-1})
- Таким образом, на втором шаге алгоритма из системы будут исключены переменные с номерами, кратными 2, но не кратными 4, и т.д. На последнем шаге остается только одно уравнение относительно одного «центрального» неизвестного

Метод редукции (прямой ход)

- Сначала система уравнений совпадает с исходной, затем происходит исключение неизвестных с нечетными номерами, и т.д. Стрелки указывают, какие переменные участвовали в исключении.
- На последнем этапе (l=2) остается только одно уравнение, связывающее x_0, x_4 и x_8.



Метод редукции (обратный ход)

- В общем случае процесс закончится на (*q*–1)-м шаге, $q = \log_2 n$, система будет состоять из одного уравнения относительно $x_{n/2} = x_{2^{q-1}}$. Из этого уравнения, найдем

$$x_{2^{q-1}} = \frac{f_{2^{q-1}}^{(q-1)}}{c_{2^{q-1}}^{(q-1)}}$$

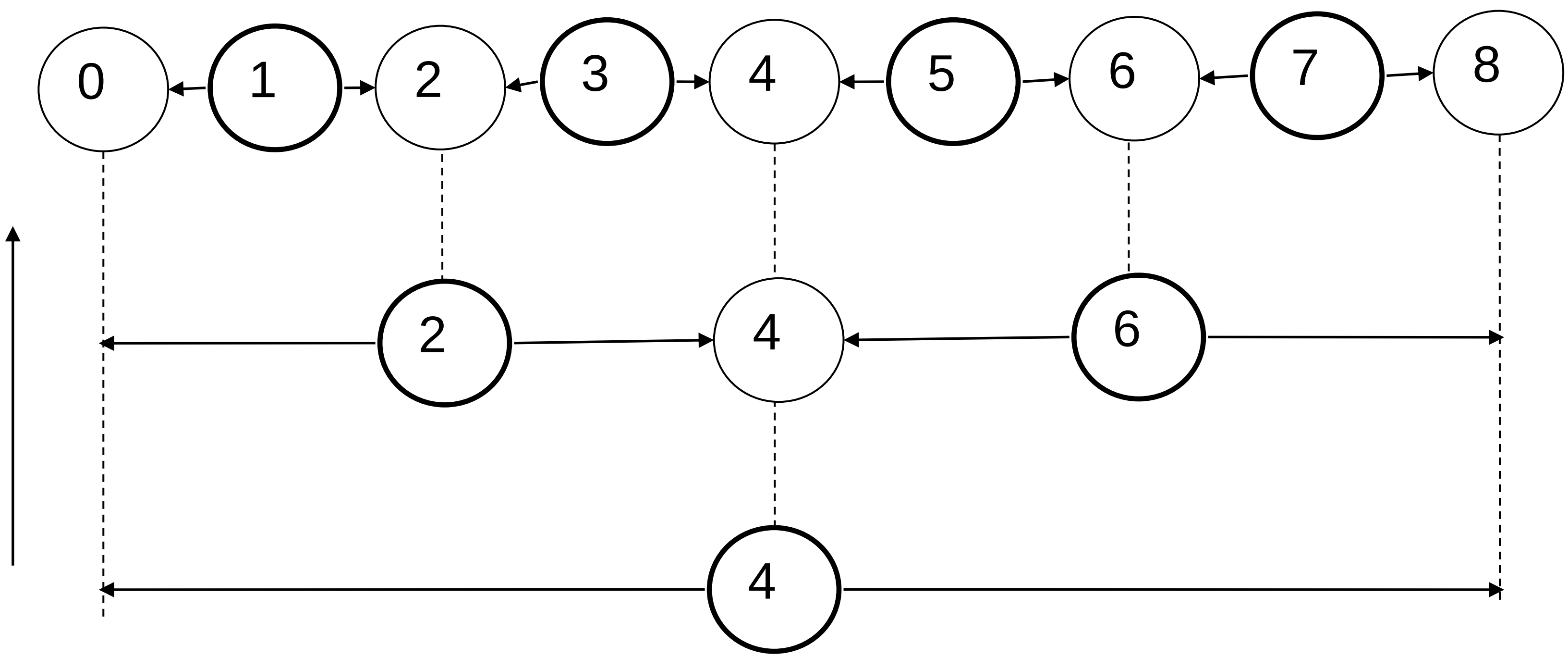
- Остальные переменные определяются по формулам

$$x_i = \frac{f_i^{(l)} - a_i^{(l)} x_{i-2^l} - b_i^{(l)} x_{i+2^l}}{c_i^{(l)}} \qquad i = 2^l, 3\cdot 2^l, 5\cdot 2^l, \dots, n-2^l$$

- Общее число операций, требующееся для решения системы уравнений методом редукции, – 12*n* сложений, 8*n* умножений, 3*n* делений, т.е. метод является примерно таким же по трудоемкости, как и метод прогонки.

Метод редукции (обратный ход)

- При обратном ходе переменные пересчитываются последовательно снизу вверх (пересчитываемые на каждом шаге переменные выделены, стрелками от них указаны переменные, значения которых используются в вычислениях)

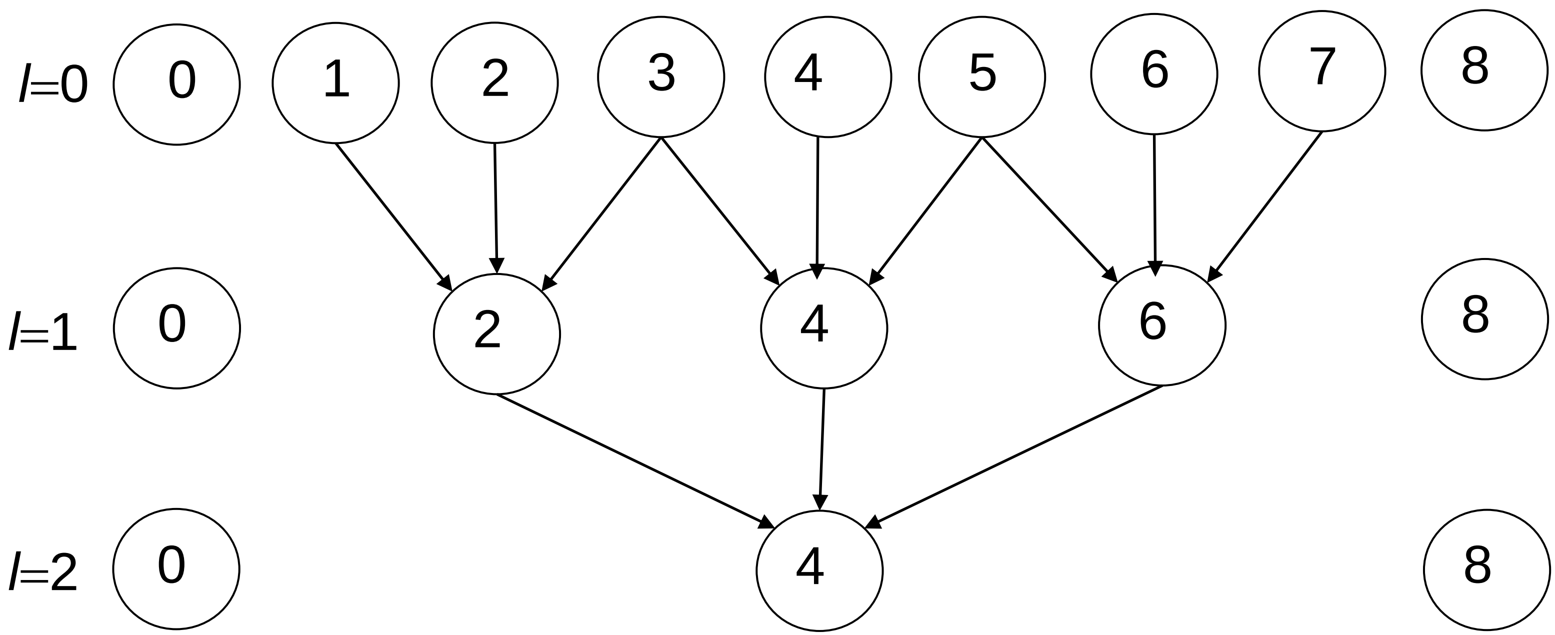


Распараллеливание метода редукции

- Каждый последующий шаг прямого и обратного хода зависит от предыдущего – распараллелить целиком прямой или обратный ход не получается.
- Исключение неизвестных на отдельном шаге прямого хода можно проводить независимо, т.к. в этом случае зависимостей по данным нет. Аналогично может быть распараллелен отдельный шаг обратного хода, т.к. значения неизвестных находятся независимо.
- Можно ожидать низких показателей эффективности при решении систем малого размера

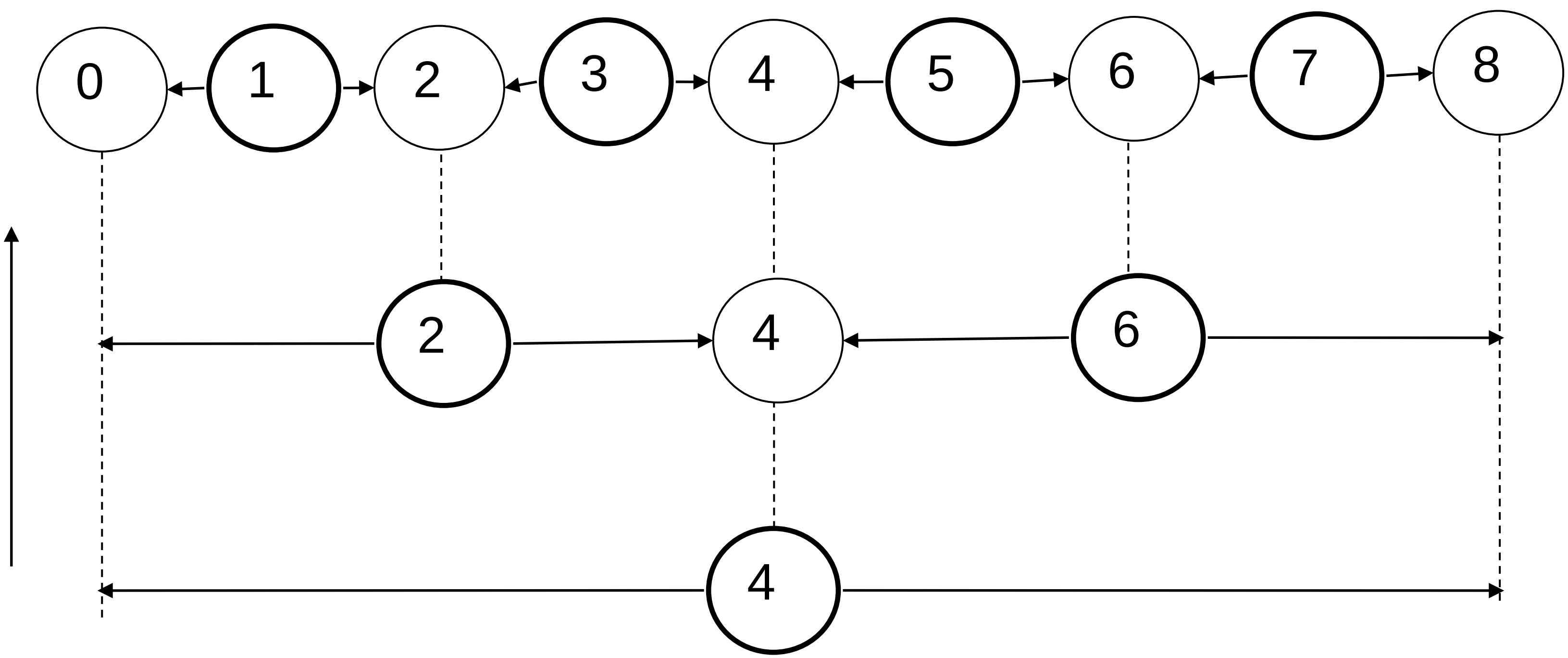
Распараллеливание метода редукции

- На первом шаге прямого хода можно параллельно вычислить коэффициенты редуцированной системы уравнений относительно переменных x_2, x_4, x_6.



Распараллеливание метода редукции

- На первом шаге обратного хода можно параллельно вычислить значения переменных x_2, x_6, а на втором шаге – значения x_1, x_3, x_5, x_7.

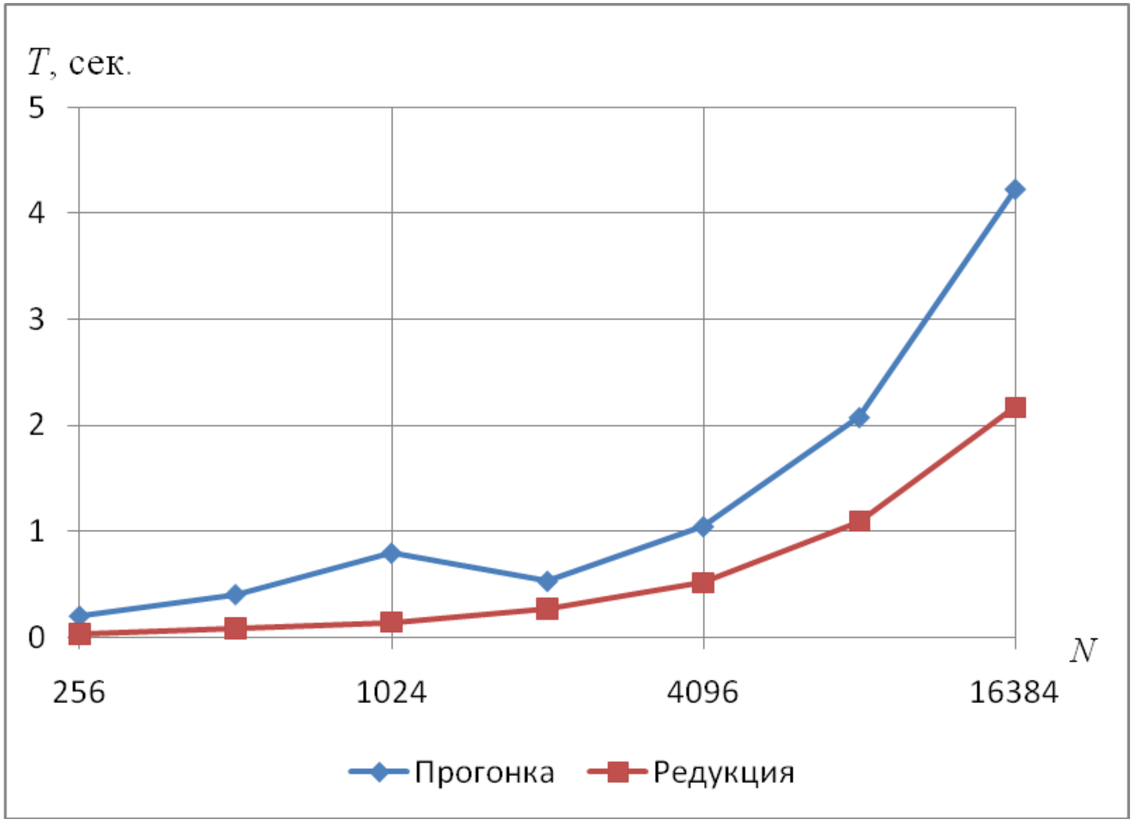


Результаты экспериментов

- Эффективность метода будем определять при многократном решение системы уравнений с одинаковой матрицей небольшого размера и различными правыми частями (в отличие от решения одной задачи с матрицей большого размера).
- Решение такой последовательности задач возникает, например, при численном решении дифференциальных уравнений в частных производных сеточными методами.
- Решалась серия из 10 тыс. задач, специфика серии:
  - матрица СЛАУ не зависит от номера задачи в серии;
  - на диагонали расположены одинаковые числа;
  - правая часть j-й задачи нелинейно зависит от решения (j–1)-й задачи, правая часть первой задачи в серии – известна;
  - Для простоты написания параллельных программ рассматривались задачи размера, кратного степени двух.

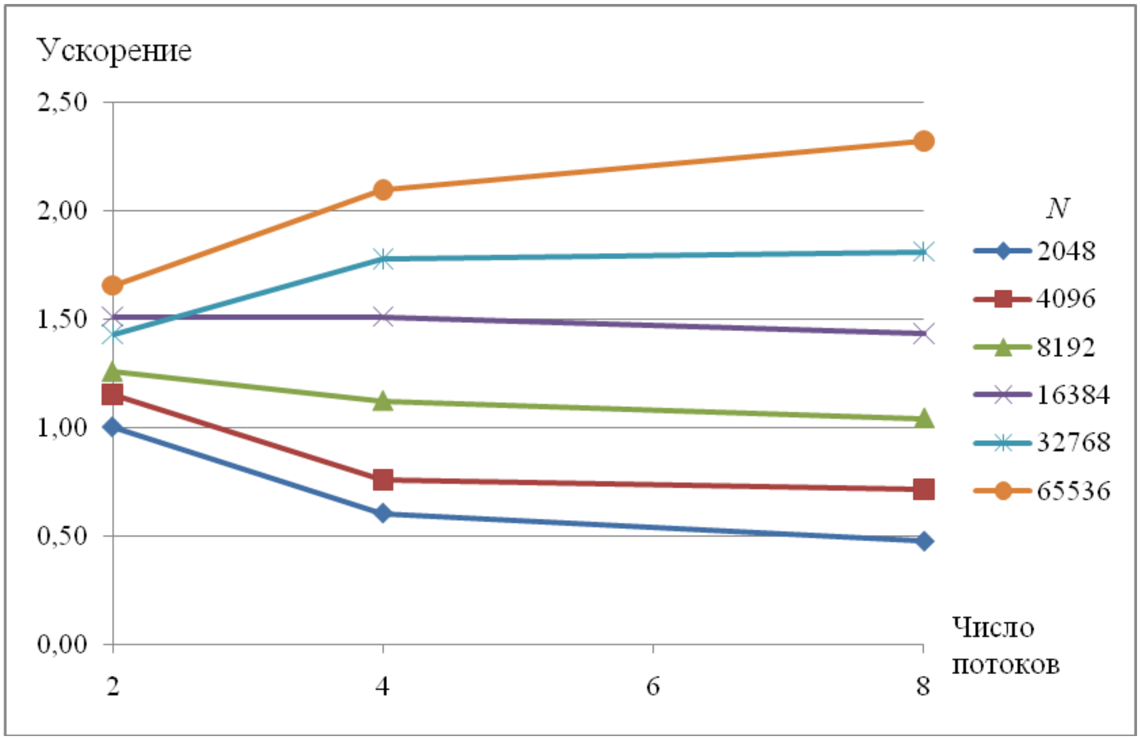
Результаты экспериментов

- Сравнение методов прогонки и редукции



Результаты экспериментов

- Масштабируемость параллельного метода редукции



- Плохая масштабируемость при решении систем малого размера

Результаты экспериментов

- Распараллеливание выполнено на уровне внутреннего цикла прямого и обратного хода редукции, т.е. на каждой итерации редукции порождается или возобновляется несколько потоков, выполняется синхронизация, и т.д. - значительное влияние накладных расходов на организацию параллелизма.

- Неэффективная работа с памятью. Пересчет правых частей СЛАУ и вычисление решения осуществляется с некоторым регулярным шагом по массивам, в которых хранятся коэффициенты. Это приводит к многочисленным кэш-промахам при увеличении числа потоков.

- Таким образом, что решать системы с ленточной матрицей с использованием параллельных алгоритмов целесообразно лишь при достаточно большом размере матрицы.

Литература

1. Вержбицкий В.М. Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения). – М.: Высшая школа, 2001.
2. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989.
3. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. – М.: Мир, 1999.

Ресурсы сети Интернет

4. Интернет-университет суперкомпьютерных технологий. [http://www.hpcu.ru].
5. Intel Math Kernel Library Reference Manual. [http://software.intel.com/sites/products/documentation/hpc/mkl/mklman.pdf].

Авторский коллектив

- Баркалов Константин Александрович,
  к.ф.-м.н., старший преподаватель кафедры Математического обеспечения ЭВМ факультета ВМК ННГУ.
  barkalov@fup.unn.ru

- Коды учебных программ разработаны Маловой Анной и Сафоновой Яной