

Matemática Numérica Paralela

Pedro H A Konzen

24 de março de 2021

Licença

Este trabalho está licenciado sob a Licença Atribuição-CompartilhaIgual 4.0 Internacional Creative Commons. Para visualizar uma cópia desta licença, visite http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.pt_BR ou mande uma carta para Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Prefácio

Nestas notas de aula são abordados tópicos sobre computação paralela aplicada a métodos numéricos. Como ferramentas computacionais de apoio, exploramos exemplos de códigos em C/C++ usando as interfaces de programação de aplicações [OpenMP](#), [OpenMPI](#) e o pacote de computação científica [GSL](#).

Agradeço a todos e todas que de modo assíduo ou esporádico contribuem com correções, sugestões e críticas. :)

Pedro H A Konzen

Sumário

Capa	i
Licença	ii
Prefácio	iii
Sumário	v
1 Introdução	1
2 Multiprocessamento (MP)	4
2.1 Olá, Mundo!	4
2.2 Construtores básicos	9
2.2.1 Variáveis privadas e variáveis compartilhadas	9
2.2.2 Laço e Redução	10
2.2.3 Sincronização	15
2.3 Resolução de Sistema Linear Triangular	23
2.4 Decomposição LU	29
2.5 Métodos iterativos para Sistemas Lineares	36
2.5.1 Método de Jacobi	36
2.5.2 Método <i>tipo</i> Gauss-Seidel	40
2.5.3 Método do Gradiente Conjugado	43
2.6 Métodos iterativos para problemas não lineares	52
2.6.1 Método de Newton	53
2.6.2 Método do acorde	53
2.6.3 Métodos <i>quasi</i> -Newton	54
3 Computação paralela e distribuída (MPI)	57
3.1 Olá, Mundo!	57

Respostas dos Exercícios	63
---------------------------------	-----------

Referências Bibliográficas	64
-----------------------------------	-----------

Capítulo 1

Introdução

A computação paralela e distribuída é uma realidade em todas as áreas de pesquisa aplicadas. À primeira vista, pode-se esperar que as aplicações se beneficiam diretamente do ganho em poder computacional. Afinal, se a carga (processo) computacional de uma aplicação for repartida e distribuída em $n_p > 1$ processadores (**instâncias de processamentos**, *threads* ou *cores*), a computação paralela deve ocorrer em um tempo menor do que se a aplicação fosse computada em um único processador (em serial). Entretanto, a tarefa de repartir e distribuir (**alocação de tarefas**) o processo computacional de uma aplicação é, em muitos casos, bastante desafiadora e pode, em vários casos, levar a códigos computacionais menos eficientes que suas versões seriais.

Repartir e distribuir o processo computacional de uma aplicação sempre é possível, mas nem sempre é possível a computação paralela de cada uma das partes. Por exemplo, vamos considerar a [iteração de ponto fixo](#)

$$x(n) = f(x(n-1)), \quad n \geq 1, \quad (1.1)$$

$$x(0) = x_0, \quad (1.2)$$

onde $f : x \mapsto f(x)$ é uma função dada e x_0 é o ponto inicial da iteração. Para computar $x(100)$ devemos processar 100 vezes a iteração (1.1). Se tivéssemos a disposição $n_P = 2$ processadores, poderíamos repartir a carga de processamento em dois, distribuindo o processamento das 50 primeiras iterações para o primeiro processador (o processador 0) e as demais 50 para o segundo processador (o processador 1). Entretanto, pela característica do processo iterativa, o processador 1 ficaria ocioso, aguardando o processador 0 computar $x(50)$. Se ambas instâncias de processamento compartilharem

a mesma memória computacional (**memória compartilhada**), então, logo que o processador 0 computar $x(50)$ ele ficará ocioso, enquanto que o processador 1 computará as últimas 50 iterações. Ou seja, esta abordagem não permite a computação em paralelo, mesmo que reparta e distribua o processo computacional entre duas instâncias de processamento.

Ainda sobre a abordagem acima, caso as instâncias de processamento sejam de **memória distribuída** (não compartilhem a mesma memória), então o processador 0 e o processador 1 terão de se comunicar, isto é, o processador 0 deverá enviar $x(50)$ para a instância de processamento 1 e esta instância deverá receber $x(50)$ para, então, iniciar suas computações. A **comunicação** entre as instâncias de processamento levanta outro desafio que é necessidade ou não da **sincronização** () eventual entre elas. No caso de nosso exemplo, é a necessidade de sincronização na computação de $x(50)$ que está minando a computação paralela.

Em resumo, o design de métodos numéricos paralelos deve levar em consideração a **alocação de tarefas**, a **comunicação** e a **sincronização** entre as instâncias de processamentos. Vamos voltar ao caso da iteração (1.1). Agora, vamos supor que $x = (x_0, x_1)$, $f : x \mapsto (f_0(x), f_1(x))$ e a condição inicial $x(0) = (x_0(0), x_1(0))$ é dada. No caso de termos duas instâncias de processamentos disponíveis, podemos computar as iterações em paralelo da seguinte forma. Iniciamos distribuindo x às duas instâncias de processamento 0 e 1. Em paralelo, a instância 0 computa $x_0(1) = f_0(x)$ e a instância 1 computa $x_1(1) = f_1(x)$. Para computar a nova iterada $x(2)$, a instância 0 precisa ter acesso a $x_1(1)$ e a instância 1 necessita de $x_0(1)$. Isto implica na sincronização das instâncias de processamentos, pois uma instância só consegue seguir a computação após a outra instância ter terminado a computação da mesma iteração. Agora, a comunicação entre as instâncias de processamento, depende da arquitetura do máquina. Se as instâncias de processamento compartilham a mesma memória (memória compartilhada), cada uma tem acesso direto ao resultado da outra. No caso de uma arquitetura de memória distribuída, ainda há a necessidade de instruções de comunicação entre as instâncias, i.e. a instância 0 precisa enviar $x_0(1)$ à instância 1, a qual precisa receber o valor enviado. A instância 1 precisa enviar $x_1(1)$ à instância 0, a qual precisa receber o valor enviado. O processo segue análogo para cada iteração até a computação de $x(100)$.

A primeira parte destas notas de aula, restringe-se a implementação de métodos numéricos paralelos em uma arquitetura de memória compartilhada. Os exemplos computacionais são apresentados em linguagem C/C++ com a

interface de programação de aplicações (API, *Application Programming Interface*) [OpenMP](#). A segunda parte, dedica-se a implementação paralela em arquitetura de memória distribuída. Os códigos C/C++ são, então, construídos com a API [OpenMPI](#).

Capítulo 2

Multiprocessamento (MP)

Neste capítulo, vamos estudar aplicações da computação paralela em arquitetura de memória compartilhada. Para tanto, vamos discutir código C/C++ com a API [OpenMP](#).

2.1 Olá, Mundo!

A computação paralela com MP inicia-se por uma instância de processamento **thread master**. Todas as instâncias de processamento disponíveis (**threads**) leem e escrevem variáveis compartilhadas. A ramificação (*fork*) do processo entre os *threads* disponíveis é feita por instrução explícita no início de uma região paralela do código. Ao final da região paralela, todos os *threads* sincronizam-se (*join*) e o processo segue apenas com o *thread master*. Veja a Figura 2.1.

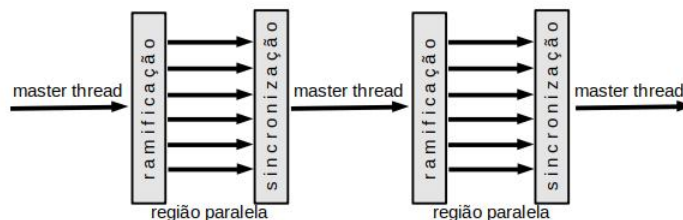


Figura 2.1: Fluxograma de um processo MP.

Vamos escrever nosso primeiro programa MP. O Código `ola.cc` inicia uma

região paralela e cada instância de processamento escreve “Olá” e identifica-se.

Código: ola.cc

```
1 #include <stdio.h>
2
3 // OpenMP API
4 #include <omp.h>
5
6 using namespace std;
7
8 int main(int argc, char *argv[]) {
9
10     // região paralela
11     #pragma omp parallel
12     {
13         // id da instância de processamento
14         int id = omp_get_thread_num();
15
16         printf("Processo %d, olá!\n", id);
17     }
18
19     return 0;
20 }
```

Na linha 4, o API OpenMP é incluído no código. A região paralela vale dentro do escopo iniciado pela instrução

```
# pragma omp parallel
```

i.e., entre as linhas 12 e 17. Em paralelo, cada *thread* registra seu número de identificação na variável *id*, veja a linha 14. Na linha 16, escrevem a saudação, identificando-se.

Para compilar este código, digite no terminal

```
$ g++ -fopenmp ola.cc
```

Ao compilar, um executável *a.out* será criado. Para executá-lo, basta digitar no terminal:

```
$ a.out
```

Ao executar, devemos ver a saída do terminal como algo parecido com¹

```
Processo 0, olá!  
Processo 3, olá!  
Processo 1, olá!  
Processo 2, olá!
```

A saída irá depender do número de *threads* disponíveis na máquina e a ordem dos *threads* pode variar a cada execução. Execute o código várias vezes e analise as saídas!

Observação 2.1.1. As variáveis declaradas dentro de uma região paralela são privadas de cada *threads*. As variáveis declaradas fora de uma região paralela são globais, sendo acessíveis por todos os *threads*.

Exercícios resolvidos

ER 2.1.1. O número de instâncias de processamento pode ser alterado pela variável do sistema `OMP_NUM_THREADS`. Altere o número de *threads* para 2 e execute o Código ola.cc.

Solução. Para alterar o número de *threads*, pode-se digitar no terminal

```
$ export OMP_NUM_THREADS=2
```

Caso já tenha compilado o código, não é necessário recompilá-lo. Basta executá-lo com

```
$ ./a.out
```

A saída deve ser algo do tipo

```
Olá, processo 0  
Olá, processo 1
```

◇

¹O código foi rodado em uma máquina Quadcore com 4 *threads*.

ER 2.1.2. Escreva um código MP para ser executado com 2 *threads*. O *master thread* deve ler dois números em ponto flutuante. Então, em paralelo, um dos *threads* deve calcular a soma dos dois números e o outro thread deve calcular o produto.

Solução.

Código: sp.cc

```
1 #include <iostream>
2
3 // OpenMP API
4 #include <omp.h>
5
6 using namespace std;
7
8 int main(int argc, char *argv[]) {
9
10     double a,b;
11     printf("Digite o primeiro número: ");
12     scanf("%lf", &a);
13
14     printf("Digite o segundo número: ");
15     scanf("%lf", &b);
16
17     // região paralela
18 #pragma omp parallel
19 {
20     // id do processo
21     int id = omp_get_thread_num();
22
23     if (id == 0) {
24         printf("Soma: %f\n", (a+b));
25     }
26     else if (id == 1) {
27         printf("Produto: %f\n", (a*b));
28     }
29 }
30
31 return 0;
```

32 | }

◇

Exercícios

E 2.1.1. Defina um número de *threads* maior do que o disponível em sua máquina. Então, rode o código `ola.cc` e analise a saída. O que você observa?

E 2.1.2. Modifique o código `ola.cc` de forma que cada *thread* escreva na tela “Processo ID de NP, olá!”, onde ID é a identificação do *thread* e NP é o número total de *threads* disponíveis. O número total de *threads* pode ser obtido com a função OpenMP

```
omp_get_num_threads();
```

E 2.1.3. Faça um código MP para ser executado com 2 *threads*. O *master thread* deve ler dois números a e b não nulos em ponto flutuante. Em paralelo, um dos *thread* de computar $a - b$ e o outro deve computar a/b . Por fim, o *master thread* deve escrever $(a - b) + (a/b)$.

E 2.1.4. Escreva um código MP para computar a multiplicação de uma matriz $n \times n$ com um vetor de n elementos. Inicialize todos os elementos com números randômicos em ponto flutuante. Ainda, o código deve ser escrito para um número arbitrário $m > 1$ de instâncias de processamento. Por fim, compare o desempenho do código MP com uma versão serial do código.

E 2.1.5. Escreva um código MP para computar o produto de uma matriz $n \times m$ com uma matriz de $m \times n$ elementos, com $n \geq m$. Inicialize todos os elementos com números randômicos em ponto flutuante. Ainda, o código deve ser escrito para um número arbitrário $m > 1$ de instâncias de processamento. Por fim, compare o desempenho do código MP com uma versão serial do código.

2.2 Construtores básicos

2.2.1 Variáveis privadas e variáveis compartilhadas

Vamos analisar o seguinte código.

Código: vpc.cc

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <omp.h>
3
4 int main(int argc, char *argv[]) {
5
6     int tid, nt;
7
8     // região paralela
9 #pragma omp parallel
10 {
11     tid = omp_get_thread_num();
12     nt = omp_get_num_threads();
13
14     printf("Processo %d/%d\n", tid, nt);
15 }
16 printf("%d\n", nt);
17 return 0;
18 }
```

Qual seria a saída esperada? Ao rodarmos este código, veremos uma saída da forma

```
Processo 0/4
Processo 2/4
Processo 3/4
Processo 3/4
```

Isto ocorre por uma situação de **condição de corrida** (**race condition**) entre os *threads*. As variáveis `tid` e `nt` foram declaradas antes da região paralela e, desta forma, são **variáveis compartilhadas** (**shared variables**) entre todos os *threads* na região paralela. Os locais na memória em que estas as variáveis estão alocadas é o mesmo para todos os *threads*.

A condição de corrida ocorre na linha 11. No caso da saída acima, as instâncias de processamento 1 e 3 entraram em uma condição de corrida no registro da variável `tid`.

Observação 2.2.1. Devemos estar sempre atentos a uma possível condição de corrida. Este é um erro comum no desenvolvimento de códigos em paralelo.

Para evitarmos a condição de corrida, precisamos tornar a variável `tid` privada na região paralela. I.e., cada *thread* precisa ter uma variável `tid` privada. Podemos fazer isso alterando a linha 9 do código para

```
#pragma omp parallel private(tid)
```

Com essa alteração, a saída terá o formato esperado, como por exemplo

```
Processo 0/4  
Processo 3/4  
Processo 2/4  
Processo 1/4
```

Faça a alteração e verifique!

Observação 2.2.2. A diretiva `#pragma omp parallel` também aceita as instruções:

- `default(private|shared|none)`: o padrão é `shared`;
- `shared(var1, var2, ..., varn)`: para especificar explicitamente as variáveis que devem ser compartilhadas.

2.2.2 Laço e Redução

Vamos considerar o problema de computar

$$s = \sum_{i=0}^{99999999} 1 \quad (2.1)$$

em paralelo com *np threads*. Começamos analisando o seguinte código

Código: soma0.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <math.h>
4
5 int main(int argc, char *argv[]) {
6
7     int n = 99999999;
8
9     int s = 0;
10    #pragma omp parallel
11    {
12        int tid = omp_get_thread_num();
13        int nt = omp_get_num_threads();
14
15        int ini = n/nt*tid;
16        int fin = n/nt*(tid+1);
17        if (tid == nt-1)
18            fin = n;
19        for (int i=ini; i<fin; i++)
20            s += 1;
21    }
22    printf("%d\n",s);
23    return 0;
24 }
```

Ao executarmos este código com $nt > 1$, vamos ter saídas erradas. Verifique! Qual o valor esperado?

O erro do código está na **condição de corrida** (*race condition*) na linha 20. Esta é uma operação, ao ser iniciada por um *thread*, precisa ser terminada pelo *thread* antes que outro possa iniciá-la. Podemos fazer adicionando o construtor

```
#pragma omp critical
```

imediatamente antes da linha de código `s += i;`. O código fica como segue, verifique!

Código: soma1.cc


```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <math.h>
4
5 int main(int argc, char *argv[]) {
6
7     int n = 99999999;
8
9     int s = 0;
10    #pragma omp parallel
11    {
12        int tid = omp_get_thread_num();
13        int nt = omp_get_num_threads();
14
15        int ini = n/nt*tid;
16        int fin = n/nt*(tid+1);
17        if (tid == nt-1)
18            fin = n;
19        for (int i=ini; i<fin; i++)
20            #pragma omp critical
21            s += 1;
22    }
23    printf("%d\n",s);
24    return 0;
25 }
```

Esta abordagem evita a condição de corrida e fornece a resposta esperada. No entanto, ela acaba serializando o código, o qual é será muito mais lento que o código serial. Verifique!

Observação 2.2.3. A utilização do construtor

`#pragma omp critical`

reduz a performance do código e só deve ser usada quando realmente necessária.

Uma alternativa é alocar as somas parciais de cada *thread* em uma variável privada e, ao final, somar as partes computadas. Isto pode ser feito com o seguinte código. Verifique!

Código: soma2.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <math.h>
4
5 int main(int argc, char *argv[]) {
6
7     int n = 99999999;
8
9     int s = 0;
10    #pragma omp parallel
11    {
12        int tid = omp_get_thread_num();
13        int nt = omp_get_num_threads();
14
15        int ini = n/nt*tid;
16        int fin = n/nt*(tid+1);
17        if (tid == nt-1)
18            fin = n;
19
20        int st = 0;
21        for (int i=ini; i<fin; i++)
22            st += 1;
23
24        #pragma omp critical
25        s += st;
26    }
27    printf("%d\n",s);
28    return 0;
29 }
```

Este último código pode ser simplificado usando o construtor

```
#pragma omp for
```

Com este construtor, o laço do somatório pode ser automaticamente distribuído entre os *threads*. Verifique o seguinte código!

Código: somafor.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <math.h>
4
5 int main(int argc, char *argv[]) {
6
7     int n = 99999999;
8
9     int s = 0;
10    #pragma omp parallel
11    {
12        int st = 0;
13
14        #pragma omp for
15        for (int i=0; i<n; i++)
16            st += 1;
17
18        #pragma omp critical
19        s += st;
20    }
21    printf("%d\n",s);
22    return 0;
23 }
```

Mais simples e otimizado, é automatizar a operação de redução (no caso, a soma das somas parciais) adicionado

`reduction(+: s)`

ao construtor que inicializa a região paralela. Verifique o seguinte código!

Código: soma.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <math.h>
4
5 int main(int argc, char *argv[]) {
6
7     int n = 99999999;
```

```
8   int s = 0;
9
10  #pragma omp parallel for reduction(+: s)
11  for (int i=0; i<n; i++)
12      s += 1;
13
14  printf("%d\n",s);
15  return 0;
16 }
```

Observação 2.2.4. A instrução de redução pode ser usada com qualquer operação binária aritmética (+, -, /, *), lógica (&, |) ou procedimentos intrínsecos (max, min).

2.2.3 Sincronização

A sincronização dos *threads* deve ser evitada sempre que possível, devido a perda de performance em códigos paralelos. Atenção, ela ocorre implicitamente no término da região paralela!

Barreira

No seguinte código, o *thread* 1 é atrasado em 1 segundo, de forma que ele é o último a imprimir. Verifique!

Código: sinc0.cc

```
1  #include <stdio.h>
2  #include <ctime>
3  #include <omp.h>
4
5  int main(int argc, char *argv[]) {
6
7      // master thread id
8      int tid = 0;
9      int nt;
10
11     #pragma omp parallel private(tid)
12     {
```

```
13     tid = omp_get_thread_num();
14     nt = omp_get_num_threads();
15
16     if (tid == 1) {
17         // delay 1s
18         time_t t0 = time(NULL);
19         while (time(NULL) - t0 < 1) {
20             }
21     }
22
23     printf("Processo %d/%d.\n", tid, nt);
24 }
25 return 0;
26 }
```

Agora, podemos forçar a sincronização dos *threads* usando o construtor

`#pragma omp barrier`

em uma determinada linha do código. Por exemplo, podemos fazer todos os *threads* esperarem pelo *thread* 1 no código acima. Veja a seguir o código modificado. Teste!

Código: `sinc1.cc`

```
1  #include <stdio.h>
2  #include <ctime>
3  #include <omp.h>
4
5  int main(int argc, char *argv[]) {
6
7      // master thread id
8      int tid = 0;
9      int nt;
10
11     #pragma omp parallel private(tid)
12     {
13         tid = omp_get_thread_num();
14         nt = omp_get_num_threads();
15     }
```

```
16     if (tid == 1) {
17         // delay 1s
18         time_t t0 = time(NULL);
19         while (time(NULL) - t0 < 1) {
20             }
21     }
22
23     #pragma omp barrier
24
25     printf("Processo %d/%d.\n", tid, nt);
26 }
27 return 0;
28 }
```

Seção

O construtor `sections` pode ser usado para determinar seções do código que deve ser executada de forma serial apenas uma vez por um único *thread*. Verifique o seguinte código.

Código: `secao.cc`

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <ctime>
3 #include <omp.h>
4
5 int main(int argc, char *argv[]) {
6
7     // master thread id
8     int tid = 0;
9     int nt;
10
11     #pragma omp parallel private(tid)
12     {
13         tid = omp_get_thread_num();
14         nt = omp_get_num_threads();
15
16         #pragma omp sections
17         {
```

```
18     // seção 1
19     #pragma omp section
20     {
21         printf("%d/%d exec seção 1\n", \
22             tid, nt);
23     }
24
25     // seção 2
26     #pragma omp section
27     {
28         // delay 1s
29         time_t t0 = time(NULL);
30         while (time(NULL) - t0 < 1) {
31             }
32         printf("%d/%d exec a seção 2\n", \
33             tid, nt);
34     }
35 }
36
37 printf("%d/%d terminou\n", tid, nt);
38 }
39
40 return 0;
41 }
```

No código acima, o primeiro *thread* que alcançar a linha 19 é o único a executar a seção 1 e, o primeiro que alcançar a linha 25 é o único a executar a seção 2.

Observe que ocorre a sincronização implícita de todos os *threads* ao final do escopo `sections`. Isso pode ser evitado usando a cláusula `nowait`, i.e. alterando a linha 16 para

```
# pragma omp sections nowait
```

Teste!

Observação 2.2.5. A cláusula `nowait` também pode ser usada com o construtor `for`, i.e.

```
#pragma omp for nowait
```

Para uma região contendo apenas uma seção, pode-se usar o construtor

```
#pragma omp single
```

Isto é equivalente a escrever

```
#pragma omp sections
    #pragma omp section
```

Exercícios Resolvidos

ER 2.2.1. Escreva um código MP para computar o produto escalar entre dois vetores de n pontos flutuantes randômicos.

Solução. Aqui, vamos usar o suporte a vetores e números randômicos do pacote de computação científica [GSL](#). A solução é dada no código a seguir.

Código: prodesc.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <ctime>
4
5 // GSL vector suport
6 #include <gsl/gsl_vector.h>
7 #include <gsl/gsl_rng.h>
8
9 int main(int argc, char *argv[]) {
10
11     int n = 99999999;
12
13     // vetores
14     gsl_vector *a = gsl_vector_alloc(n);
15     gsl_vector *b = gsl_vector_alloc(n);
16
17     // gerador randômico
18     gsl_rng *rng = gsl_rng_alloc(gsl_rng_default);
19     gsl_rng_set(rng, time(NULL));
20
21     // inicializa os vetores
```



```
22  #pragma omp parallel for
23  for (int i=0; i<n; i++) {
24      gsl_vector_set(a, i, gsl_rng_uniform(rng));
25      gsl_vector_set(b, i, gsl_rng_uniform(rng));
26  }
27
28  // produto escalar
29  double dot = 0;
30  #pragma omp parallel for reduction(+: dot)
31  for (int i=0; i<n; i++)
32      dot += gsl_vector_get(a, i) * \
33          gsl_vector_get(b, i);
34
35  printf("%f\n", dot);
36
37  gsl_vector_free(a);
38  gsl_vector_free(b);
39  gsl_rng_free(rng);
40
41  return 0;
42 }
```

Para compilar o código acima, digite

```
$ g++ -fopenmp prodesc.cc -lgsl -lgslcblas
```

◇

ER 2.2.2. Faça um código MP para computar a multiplicação de uma matriz A $n \times n$ por um vetor de n elementos (pontos flutuantes randômicos). Utilize o construtor `omp sections` para distribuir a computação entre somente dois *threads*.

Solução. Vamos usar o suporte a matrizes, vetores, BLAS e números randômicos do pacote de computação científica [GSL](#). A solução é dada no código a seguir.

Código: AxSecoes.cc

```
1 #include <omp.h>
```

```
2 #include <stdio.h>
3 #include <ctime>
4
5 #include <gsl/gsl_matrix.h>
6 #include <gsl/gsl_vector.h>
7 #include <gsl/gsl_rng.h>
8 #include <gsl/gsl_blas.h>
9
10 int main(int argc, char *argv[]) {
11
12     int n = 9999;
13
14     // vetores
15     gsl_matrix *a = gsl_matrix_alloc(n,n);
16     gsl_vector *x = gsl_vector_alloc(n);
17     gsl_vector *y = gsl_vector_alloc(n);
18
19     // gerador randômico
20     gsl_rng *rng = gsl_rng_alloc(gsl_rng_default);
21     gsl_rng_set(rng, time(NULL));
22
23     // inicialização
24     for (int i=0; i<n; i++) {
25         for (int j=0; j<n; j++) {
26             gsl_matrix_set(a, i, j, gsl_rng_uniform(rng));
27         }
28         gsl_vector_set(x, i, gsl_rng_uniform(rng));
29     }
30
31     //gsl_blas_dgemv(CblasNoTrans, 1.0, a, x, 0.0, y);
32
33     // y = A*x
34     #pragma omp parallel sections
35     {
36         #pragma omp section
37         {
38             gsl_matrix_const_view as1
39             = gsl_matrix_const_submatrix(a,
```

```
40         0,0,
41         n/2,n);
42     gsl_vector_view ys1
43     = gsl_vector_subvector(y,0,n/2);
44     gsl_blas_dgemv(CblasNoTrans,
45         1.0, &as1.matrix, x,
46         0.0, &ys1.vector);
47 }
48
49 #pragma omp section
50 {
51     gsl_matrix_const_view as2
52     = gsl_matrix_const_submatrix(a,
53         n/2,0,
54         (n-n/2),n);
55     gsl_vector_view ys2
56     = gsl_vector_subvector(y,n/2,(n-n/2));
57     gsl_blas_dgemv(CblasNoTrans,
58         1.0, &as2.matrix, x,
59         0.0, &ys2.vector);
60 }
61 }
62
63 //for (int i=0; i<n; i++)
64 //printf("%f\n", gsl_vector_get(y,i));
65
66 gsl_matrix_free(a);
67 gsl_vector_free(x);
68 gsl_vector_free(y);
69 gsl_rng_free(rng);
70
71 return 0;
72 }
```

◇

Exercícios

E 2.2.1. Considere o seguinte código

```
1   int tid = 10;
2   #pragma omp parallel private(tid)
3   {
4       tid = omp_get_thread_num();
5   }
6   printf("%d\n", tid);
```

Qual o valor impresso?

E 2.2.2. Escreva um código MP para computar uma aproximação para

$$I = \int_{-1}^1 e^{-x^2} dx \quad (2.2)$$

usando a [regra composta do trapézio](#) com n subintervalos uniformes.

E 2.2.3. Escreva um código MP para computar uma aproximação para

$$I = \int_{-1}^1 e^{-x^2} dx \quad (2.3)$$

usando a [regra composta de Simpson](#) com n subintervalos uniformes. Dica: evite sincronizações desnecessárias!

E 2.2.4. Escreva um código MP para computar a multiplicação de uma matriz A $n \times n$ por um vetor x de n elementos (pontos flutuantes randômicos). Faça o código de forma a suportar uma arquitetura com $n_p \geq 1$ *threads*.

E 2.2.5. Escreva um código MP para computar o produto de duas matrizes $n \times n$ de pontos flutuantes randômicos. Utilize o construtor `omp sections` para distribuir a computação entre somente dois *threads*.

E 2.2.6. Escreva um código MP para computar o produto de duas matrizes $n \times n$ de pontos flutuantes randômicos. Faça o código de forma a suportar uma arquitetura com $n_p \geq 1$ *threads*.

2.3 Resolução de Sistema Linear Triangular

Nesta seção, vamos discutir sobre a uma implementação em paralelo do método da substituição para a resolução de sistemas triangulares. Primeira-

mente, vamos considerar A uma matriz triangular inferior quadrada de dimensões $n \times n$, i.e. $A = [a_{i,j}]_{i,j=0}^{n-1}$ com $a_{i,j} = 0$ para $i < j$. Ainda, vamos considerar que A é invertível.

Neste caso, um sistema linear $Ax = b$ pode ser escrito na seguinte forma algébrica

$$a_{1,1}x_1 = b_1 \quad (2.4)$$

$$\vdots \quad (2.5)$$

$$a_{i,1}x_1 + a_{i,2}x_2 + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1} + a_{i,i}x_i = b_i \quad (2.6)$$

$$\vdots \quad (2.7)$$

$$a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + \cdots + a_{n,i}x_i + \cdots + a_{n,n}x_n = b_n \quad (2.8)$$

O algoritmo serial do método da substituição (para frente) resolve o sistema começando pelo cálculo de x_1 na primeira equação, então o cálculo de x_2 pela segunda equação e assim por diante até o cálculo de x_n pela última equação. Segue o pseudocódigo serial.

1. Para $i = 0, \dots, n - 1$:

(a) Para $j = 0, \dots, i - 1$:

i. $b_i = b_i - A_{i,j}x_j$

(b) $x_i = \frac{b_i}{A_{i,i}}$

Implemente!

Para o algoritmo paralelo, vamos considerar uma arquitetura MP com $n_p \geq 1$ instâncias de processamento. Para cada instância de processamento $1 \leq p_{id} < n_p - 1$ vamos alocar as seguintes colunas da matriz A

$$t_{ini} = p_{id} \left\lfloor \frac{n}{n_p} \right\rfloor \quad (2.9)$$

$$t_{fim} = (p_{id} + 1) \left\lfloor \frac{n}{n_p} \right\rfloor - 1 \quad (2.10)$$

e, para $p_{id} = n_p - 1$ vamos alocar as últimas colunas, i.e.

$$t_{ini} = p_{id} \left\lfloor \frac{n}{n_p} \right\rfloor \quad (2.11)$$

$$t_{fim} = n - 1 \quad (2.12)$$

Segue o pseudocódigo em paralelo.

1. Para $i = 0, \dots, n - 1$
 - (a) $s = 0$
 - (b) Região paralela
 - i. Para $j \in \{t_{ini}, \dots, t_{fim}\} \wedge \{0, \dots, i - 1\}$
 - A. $s = s + a_{i,j}x_j$
 - (c) $x_i = \frac{b_i - s}{a_{i,i}}$

O código MP C/C++ que apresentaremos a seguir, faz uso do construtor `threadprivate`

```
#pragma omp threadprivate(list)
```

Este construtor permite que a lista de variáveis (estáticas) `list` seja privada para cada *thread* e seja compartilhada entre as regiões paralelas. Por exemplo:

```
x = 0
#pragma omp parallel private(x)
  x = 1
#pragma omp parallel private(x)
  x vale 0
```

Agora, com o construtor `threadprivate`:

```
static x = 0
#pragma omp threadprivate(x)
#pragma omp parallel
  x = 1
#pragma omp parallel private(x)
  x vale 1
```

Ainda, apenas para efeito de exemplo, vamos considerar que $a_{i,j} = (-1)^{i+j}(i+j)/(ij+1)$ para $i < j$, $a_{i,i} = 2[(i-n/2)^2 + 1]/n$ e $b_i = (-1)^i/(i+1)$ para $i = 0, \dots, n - 1$.

Segue o código paralelo para a resolução direta do sistema triangular inferior. Verifique!

Código: sistria1dcol.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <ctime>
4 #include <algorithm>
5
6 #include <gsl/gsl_spmatrix.h>
7 #include <gsl/gsl_vector.h>
8 #include <gsl/gsl_rng.h>
9
10 int np, pid;
11 int ini, fim;
12 #pragma omp threadprivate(np,pid,ini,fim)
13
14 int main(int argc, char *argv[]) {
15
16     int n = 9999;
17
18     // vetores
19     gsl_spmatrix *a = gsl_spmatrix_alloc(n,n);
20     gsl_vector *b = gsl_vector_alloc(n);
21     gsl_vector *x = gsl_vector_alloc(n);
22
23     // inicialização
24     printf("Iniciando ... \n");
25
26     for (int i=0; i<n; i++) {
27         for (int j=0; j<i; j++) {
28             gsl_spmatrix_set(a, i, j,
29                             pow(-1.0,i+j)*(i+j)/(i*j+1));
30         }
31         gsl_spmatrix_set(a, i, i,
32                         (pow(i-n/2,2)+1)*2/n);
33         gsl_vector_set(b, i,
34                        pow(-1.0,i)/(i+1));
35     }
36 }
```

```
37 printf("feito.\n");
38
39 printf("Executando em paralelo ... \n");
40
41 time_t t = time(NULL);
42 #pragma omp parallel
43 {
44     np = omp_get_num_threads();
45     pid = omp_get_thread_num();
46
47     ini = pid*n/np;
48     fim = (pid+1)*n/np;
49     if (pid == np-1)
50         fim = n;
51 }
52
53 for (int i=0; i<n; i++) {
54     double s = 0;
55     #pragma omp parallel reduction(+: s)
56     {
57         for (int j=std::max(0,ini); j<i and j<fim; j++)
58             s += gsl_spmatrix_get(a,i,j) *
59                 gsl_vector_get(x,j);
60     }
61     gsl_vector_set(x, i,
62                    (gsl_vector_get(b,i) - s) /
63                    gsl_spmatrix_get(a,i,i));
64 }
65
66 t = time(NULL)-t;
67
68 printf("feito. %ld s\n", t);
69
70
71 gsl_spmatrix_free(a);
72 gsl_vector_free(b);
73 gsl_vector_free(x);
74
```



```

75 |   return 0;
76 | }

```

Exercícios resolvidos

ER 2.3.1. Seja $Ax = b$ um sistema triangular inferior de dimensões $n \times n$. O seguinte pseudocódigo paralelo é uma alternativa ao apresentado acima. Por que este pseudocódigo é mais lento que o anterior?

1. Região paralela

(a) Para $j = 0, \dots, n-1$

i. Se $j \in \{t_{ini}, \dots, t_{fim}\}$

$$A. \ x_j = \frac{b_j}{a_{j,j}}$$

ii. Para $i \in \{t_{ini}, \dots, t_{fim}\} \wedge \{j+1, \dots, n-1\}$

$$A. \ b_i = b_i - a_{i,j}x_j$$

Solução. Este código tem um número de operações semelhante ao anterior, seu desempenho é afetado pelo chamado compartilhamento falso (*false sharing*). Este é um fenômeno relacionado ao uso ineficiente da memória *cache* de cada *thread*. O último laço deste pseudocódigo faz sucessivas atualizações do vetor b , o que causa sucessivos recarregamentos de partes do vetor b da memória RAM para a memória *cache* de cada um dos *threads*. Verifique!

◇

ER 2.3.2. Seja A uma matriz triangular inferior e invertível de dimensões $n \times n$. Escreva um pseudocódigo MP para calcular a matriz inversa A^{-1} usando o método de substituição direta.

Solução. Vamos denotar $A = [a_{i,j}]_{i,j=1}^{n-1}$ e $A^{-1} = [x_{i,j}]_{i,j=1}^{n-1}$. Note que x 's são as incógnitas. Por definição, $AA^{-1} = I$, logo

$$a_{1,1}x_{1,k} = \delta_{1,k} \tag{2.13}$$

$$\dots \tag{2.14}$$

$$a_{i,1}x_{1,k} + \dots + a_{i,i-1}x_{i-1,k} + a_{i,i}x_{i,k} = \delta_{i,k} \tag{2.15}$$

$$\dots \tag{2.16}$$

$$a_{n-1,1}x_{1,k} + \dots + a_{n-1,n-1}x_{n-1,k} = \delta_{n-1,k} \tag{2.17}$$

onde, $k = 0, \dots, n-1$ e $\delta_{i,j}$ denota o Delta de Kronecker. Ou seja, o cálculo de A^{-1} pode ser feito pela resolução de n sistemas triangulares inferiores tendo A como matriz de seus coeficientes.

Para construirmos um pseudocódigo MP, podemos distribuir os sistemas lineares a entre os *threads* disponíveis. Então, cada *thread* resolve em serial seus sistemas. Segue o pseudocódigo, sendo $x_k = (x_{1,k}, \dots, x_{n-1,k})$ e $b_k = (\delta_{1,k}, \dots, \delta_{n-1,k})$.

1. Região paralela

(a) Para $k \in \{t_{ini}, \dots, t_{fim}\}$

i. resolve $Ax_k = b_k$

◇

Exercícios

E 2.3.1. Implemente um código MP do pseudocódigo discutido no ER 2.3.1. Compare o tempo computacional com o do código `sistria1dcol.cc`.

E 2.3.2. Implemente um código MP para computar a inversa de uma matriz triangular inferior de dimensões $n \times n$.

E 2.3.3. Implemente um código MP para computar a solução de um sistema linear triangular superior de dimensões $n \times n$.

E 2.3.4. Implemente um código MP para computar a inversa de uma matriz triangular superior de dimensões $n \times n$.

2.4 Decomposição LU

Nesta seção, vamos discutir sobre a paralelização da decomposição LU para matrizes. A decomposição LU de uma matriz A com dimensões $n \times n$ é

$$A = LU \tag{2.18}$$

onde L é uma matriz triangular inferior e U é uma matriz triangular superior, ambas com dimensões $n \times n$.

Para fixar as ideias, vamos denotar $A = [a_{i,j}]_{i,j=0}^{n-1}$, $L = [l_{i,j}]_{i,j=0}^{n-1}$ sendo $l_{i,i} = 1$ e $l_{i,j} = 0$ para $i > j$, e $U = [u_{i,j}]_{i,j=0}^n$ sendo $u_{i,j} = 0$ para $i < j$. O pseudoalgoritmo serial para computar a decomposição LU é

1. $U = A$, $L = I$
2. Para $k = 0, \dots, n-2$
 - (a) Para $i = k+1, \dots, n-1$
 - i. $l_{i,k} = u_{i,k}/u_{k,k}$
 - ii. Para $j = k, \dots, n-1$
 - A. $u_{i,j} = u_{i,j} - l_{i,k}u_{k,j}$

A forma mais fácil de paralelizar este algoritmo em uma arquitetura MP é paralelizando um de seus laços (itens 2., 2.(a) ou 2.(a)ii.). O laço do item 2. não é paralelizável, pois a iteração seguinte depende do resultado da iteração imediatamente anterior. Agora, os dois laços seguintes são paralelizáveis. Desta forma, o mais eficiente é paralelizarmos o segundo laço 2.(a).

O seguinte código é uma versão paralela da decomposição LU. A matriz A é inicializada como uma matriz simétrica de elementos randômicos (linhas 19-41), sendo que a decomposição é computada nas linhas 43-61.

Código: parallelLU.cc

```

1  #include <omp.h>
2  #include <stdio.h>
3  #include <ctime>
4  #include <algorithm>
5
6  #include <gsl/gsl_matrix.h>
7  #include <gsl/gsl_vector.h>
8  #include <gsl/gsl_rng.h>
9  #include <gsl/gsl_blas.h>
10
11 int main(int argc, char *argv[]) {
12
13     int n = 5;
14
15     gsl_matrix *a = gsl_matrix_alloc(n,n);
16     gsl_matrix *u = gsl_matrix_alloc(n,n);

```

```
17  gsl_matrix *l = gsl_matrix_alloc(n,n);
18
19  // gerador randômico
20  gsl_rng *rng = gsl_rng_alloc(gsl_rng_default);
21  gsl_rng_set(rng, time(NULL));
22
23  // inicialização
24  printf("Iniciando ... \n");
25  for (int i=0; i<n; i++) {
26      for (int j=0; j<i; j++) {
27          int sig = 1;
28          if (gsl_rng_uniform(rng) >= 0.5)
29              sig = -1;
30          gsl_matrix_set(a, i, j,
31                        sig*gsl_rng_uniform(rng));
32          gsl_matrix_set(a, j, i,
33                        gsl_matrix_get(a, i, j));
34      }
35      int sig = 1;
36      if (gsl_rng_uniform(rng) >= 0.5)
37          sig = -1;
38      gsl_matrix_set(a, i, i,
39                    sig*gsl_rng_uniform_pos(rng));
40  }
41  printf("feito.\n");
42
43  // U = A
44  gsl_matrix_memcpy(u,a);
45  // L = I
46  gsl_matrix_set_identity(l);
47
48  for (int k=0; k<n-1; k++) {
49      #pragma omp parallel for
50      for (int i=k+1; i<n; i++) {
51          gsl_matrix_set(l, i, k,
52                        gsl_matrix_get(u, i, k)/
53                        gsl_matrix_get(u, k, k));
54      }
55      for (int j=k; j<n; j++) {
```

```

55         gsl_matrix_set(u, i, j,
56                         gsl_matrix_get(u, i, j) -
57                         gsl_matrix_get(l, i, k) *
58                         gsl_matrix_get(u, k, j));
59     }
60 }
61 }
62
63 gsl_matrix_free(a);
64 gsl_matrix_free(u);
65 gsl_matrix_free(l);
66 gsl_rng_free(rng);
67
68 return 0;
69 }

```

Exercícios Resolvidos

ER 2.4.1. Faça um código MP para computar a solução de um sistema linear $Ax = b$ usando a decomposição LU. Assuma A uma matriz simétrica $n \times n$ de elementos randômicos, assim como os elementos do vetor b .

Solução. A decomposição LU da matriz A nos fornece as matrizes L (matriz triangular inferior) e U (matriz triangular superior), com

$$A = LU \quad (2.19)$$

Logo, temos

$$Ax = b \quad (2.20)$$

$$\Rightarrow (LU)x = b \quad (2.21)$$

$$\Rightarrow L(Ux) = b \quad (2.22)$$

Denotando $Ux = y$, temos que y é solução do sistema triangular inferior

$$Ly = b \quad (2.23)$$

e, por conseguinte, x é solução do sistema triangular superior

$$Ux = y. \quad (2.24)$$

Em síntese, o sistema $Ax = b$ pode ser resolvido com o seguinte pseudocódigo:

1. Computar a decomposição LU, $A=LU$.
2. Resolver $Ly = b$.
3. Resolver $Ux = b$.

Cada passo acima pode ser paralelizado. O código MP fica de exercício, veja E 2.4.1.

◇

ER 2.4.2. Considere a decomposição LU de uma matriz $A n \times n$. Em muitas aplicações, não há necessidade de guardar a matriz A em memória após a decomposição. Além disso, fixando-se que a diagonal da matriz L tem todos os elementos iguais a 1, podemos alocar seus elementos não nulos na parte triangular inferior (abaixo da diagonal) da própria matriz A . E, a matriz U pode ser alocada na parte triangular superior da matriz A . Faça um código MP para computar a decomposição LU de uma matriz A , alocando o resultado na própria matriz A .

Solução. O seguinte código faz a implementação pedida. Neste código, é necessário alocar apenas a matriz A , sem necessidade de locar as matrizes L e U . Da linha 17 à 39, apenas é gerada a matriz randômica A . A decomposição é computada da linha 41 a 54.

Código: parallelLU2.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <ctime>
4 #include <algorithm>
5
6 #include <gsl/gsl_matrix.h>
7 #include <gsl/gsl_vector.h>
8 #include <gsl/gsl_rng.h>
9 #include <gsl/gsl_blas.h>
10
11 int main(int argc, char *argv[]) {
12
13     int n = 5;
14
```

```
15  gsl_matrix *a = gsl_matrix_alloc(n,n);
16
17  // gerador randômico
18  gsl_rng *rng = gsl_rng_alloc(gsl_rng_default);
19  gsl_rng_set(rng, time(NULL));
20
21  // inicialização
22  printf("Iniciando ... \n");
23  for (int i=0; i<n; i++) {
24      for (int j=0; j<i; j++) {
25          int sig = 1;
26          if (gsl_rng_uniform(rng) >= 0.5)
27              sig = -1;
28          gsl_matrix_set(a, i, j,
29                        sig*gsl_rng_uniform(rng));
30          gsl_matrix_set(a, j, i,
31                        gsl_matrix_get(a, i, j));
32      }
33      int sig = 1;
34      if (gsl_rng_uniform(rng) >= 0.5)
35          sig = -1;
36      gsl_matrix_set(a, i, i,
37                    sig*gsl_rng_uniform_pos(rng));
38  }
39  printf("feito.\n");
40
41  for (int k=0; k<n-1; k++) {
42      #pragma omp parallel for
43      for (int i=k+1; i<n; i++) {
44          gsl_matrix_set(a, i, k,
45                        gsl_matrix_get(a, i, k)/
46                        gsl_matrix_get(a, k, k));
47          for (int j=k+1; j<n; j++) {
48              gsl_matrix_set(a, i, j,
49                            gsl_matrix_get(a, i, j) -
50                            gsl_matrix_get(a, i, k) *
51                            gsl_matrix_get(a, k, j));
52          }
```

```
53     }  
54 }  
55 gsl_matrix_free(a);  
56 gsl_rng_free(rng);  
57  
58 return 0;  
59 }
```

Este algoritmo demanda substancialmente menos memória computacional que o código `parallelLU.cc` visto acima. Por outro lado, ele é substancialmente mais lento, podendo demandar até o dobro de tempo. Verifique!

O aumento no tempo computacional se deve ao mau uso da memória *cache* dos processadores. A leitura de um elemento da matriz, aloca no *cache* uma sequência de elementos próximos na mesma linha. Ao escrever em um destes elementos, a alocação do *cache* é desperdiçada, forçando o *cache* a ser atualizado. Note que o código `parallelLU.cc` requer menos atualizações do *cache* que o código `parallelLU2.cc`.

◇

Exercícios

E 2.4.1. Implemente o código MP discutido no ER 2.4.1.

E 2.4.2. Implemente um código MP para computar a inversa de uma matriz simétrica de elementos randômicos usando decomposição LU.

E 2.4.3. Considere o pseudoalgoritmo serial da composição LU apresentado acima. Por que é melhor paralelizar o laço 2.(a) do que o laço 2.(a)ii.?

E 2.4.4. Use o código MP discutido no ER 2.4.2 para resolver um sistema $Ax = b$ de n equações e n incógnitas. Assuma que a matriz A seja simétrica.

E 2.4.5. Um algoritmo paralelo mais eficiente para computar a decomposição LU pode ser obtido usando-se a decomposição LU por blocos. Veja o vídeo <https://youtu.be/E8aBJsC0bY8> e implemente um código MP para computar a decomposição LU por blocos.

2.5 Métodos iterativos para Sistemas Lineares

Nesta seção, vamos discutir sobre a paralelização MP de alguns métodos iterativos para sistemas lineares

$$Ax = b \quad (2.25)$$

com $A = [a_{i,j}]_{i,j=0}^{n-1}$, $x = (x_i)_{i=0}^{n-1}$ e $b = (b_i)_{i=0}^{n-1}$.

2.5.1 Método de Jacobi

Nós podemos escrever a i -ésima equação do sistema $Ax = b$ como

$$\sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j = b_i. \quad (2.26)$$

Isolando x_i , obtemos

$$x_i = -\frac{1}{a_{i,i}} \left[\sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j - b_i \right]. \quad (2.27)$$

Nesta última equação, temos que x_i pode ser diretamente calculado se todos os elementos x_j , $j \neq i$, forem conhecidos. Isso motiva o chamado método de Jacobi que é dado pela seguinte iteração

$$x_i(0) = \text{aprox. inicial}, \quad (2.28)$$

$$x_i(t+1) = -\frac{1}{a_{i,i}} \left[\sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j(t) - b_i \right], \quad (2.29)$$

para cada $i = 0, 1, \dots, n-1$ e $t = 0, 1, 2, \dots$. O número máximo de iterações t_{\max} e o critério de parada podem ser escolhidos de forma adequada.

O pseudocódigo serial para o método de Jacobi pode ser escrito como segue

1. Alocar a aproximação inicial x^0 .
2. Para $t = 0, 1, 2, \dots, t_{\max}$:
 - (a) Para $i = 0, 1, 2, \dots, n$:

$$\text{i. } x_i = -\frac{1}{a_{i,i}} \left[\sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j^0 - b_i \right].$$

(b) Verificar o critério de parada.

(c) $x_0 = x$.

A paralelização MP no método de Jacobi pode ser feita de forma direta e eficaz pela distribuição do laço 2.(a) do pseudocódigo acima. O seguinte código é uma implementação MP do método de Jacobi. Os vetores b e x_0 são inicializados com elementos randômicos $(0, 1)$. A matriz A é inicializada como uma matriz estritamente diagonal dominante² com elementos randômicos $(-1, 1)$. O critério de parada é

$$\|x - x^0\|_2 < \text{tol}, \quad (2.30)$$

onde tol é a tolerância.

Código: pJacobi.cc

```

1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <time.h>
4
5 #include <gsl/gsl_matrix.h>
6 #include <gsl/gsl_vector.h>
7 #include <gsl/gsl_blas.h>
8 #include <gsl/gsl_rng.h>
9
10 // random +/- 1
11 double randsig(gsl_rng *rng);
12
13 int main(int argc, char *argv[]) {
14
15     int n = 999;
16     int tmax = 50;
17     double tol = 1e-8;
18
19     gsl_matrix *a = gsl_matrix_alloc(n,n);

```

²O método de Jacobi é convergente para matriz estritamente diagonal dominante.

```
20  gsl_vector *b = gsl_vector_alloc(n);
21
22  gsl_vector *x = gsl_vector_alloc(n);
23  gsl_vector *x0 = gsl_vector_alloc(n);
24
25  // gerador randômico
26  gsl_rng *rng = gsl_rng_alloc(gsl_rng_default);
27  gsl_rng_set(rng, time(NULL));
28
29  // Inicializacao
30  // Matriz estritamente diagonal dominante
31  printf("Inicializacao ... \n");
32  double sig;
33  for (int i=0; i<n; i++) {
34      double s = 0;
35      for (int j=0; j<n; j++) {
36          double aux = gsl_rng_uniform(rng);
37          gsl_matrix_set(a, i, j,
38                        randsig(rng)*aux);
39          s += aux;
40      }
41      gsl_matrix_set(a, i, i,
42                    randsig(rng) * s);
43      gsl_vector_set(b, i,
44                    randsig(rng) *
45                    gsl_rng_uniform(rng));
46      gsl_vector_set(x0, i,
47                    randsig(rng) *
48                    gsl_rng_uniform(rng));
49  }
50  printf("feito.\n");
51
52  // Jacobi
53  for (int t=0; t<tmax; t++) {
54      #pragma omp parallel for
55      for (int i=0; i<n; i++) {
56          double s = 0;
57          for (int j=0; j<i; j++)
```

```
58         s += gsl_matrix_get(a, i, j) *
59             gsl_vector_get(x0, j);
60     for (int j=i+1; j<n; j++)
61         s += gsl_matrix_get(a, i, j) *
62             gsl_vector_get(x0, j);
63     gsl_vector_set(x, i,
64                   (gsl_vector_get(b, i) - s) /
65                   gsl_matrix_get(a, i, i));
66 }
67 // critério de parada
68 // ||x-x0||_2 < tol
69 gsl_blas_daxpy(-1.0, x, x0);
70 double e = gsl_blas_dnrm2(x0);
71 printf("Iter. %d: %1.0e\n", t, e);
72 if (e < tol)
73     break;
74     gsl_vector_memcpy(x0, x);
75 }
76
77     gsl_matrix_free(a);
78     gsl_vector_free(b);
79     gsl_vector_free(x);
80     gsl_vector_free(x0);
81     gsl_rng_free(rng);
82
83     return 0;
84 }
85
86 double randsig(gsl_rng *rng)
87 {
88     double signal = 1.0;
89     if (gsl_rng_uniform(rng) >= 0.5)
90         signal = -1.0;
91     return signal;
92 }
```

2.5.2 Método *tipo* Gauss-Seidel

No algoritmo serial, observamos que ao calcularmos x_i pela iteração de Jacobi(2.27), as incógnitas x_j , $j < i$, já foram atualizadas. Isto motiva o método de Gauss-Seidel, cujo algoritmo é descrito no seguinte pseudocódigo:

1. Alocar a aproximação inicial x^0 .
2. Para $t = 0, 1, 2, \dots, t_{\max}$:
 - (a) Para $i = 0, 1, 2, \dots, n$:
 - i. $x_i = -\frac{1}{a_{i,i}} \left[\sum_{j < i} a_{i,j} x_j + \sum_{j > i} a_{i,j} x_j^0 - b_i \right]$.
 - (b) Verificar o critério de parada.
 - (c) $x^0 = x$.

Embora este método seja normalmente muito mais rápido que o método de Jacobi, ele não é paralelizável. Isto se deve ao fato de que o cálculo da incógnita x_i depende dos cálculos precedentes das incógnitas x_j , $j < i$.

No entanto, a paralelização do método de Gauss-Seidel pode ser viável no caso de matrizes esparsas. Isto ocorre quando o acoplamento entre as equações não é total, podendo-se reagrupar as equações em blocos com base nos seus acoplamentos. Com isso, os blocos podem ser distribuídos entre as instâncias de processamento e, em cada uma, o método de Gauss-Seidel é aplicado de forma serial.

Uma alternativa baseada no Método de Gauss-Seidel, é utilizar o dado atualizado x_j logo que possível, independentemente da ordem a cada iteração. A iteração do tipo Gauss-Seidel pode-se ser escrita da seguinte forma

$$x_i = -\frac{1}{a_{i,i}} \left[\sum_{\hat{j} \neq i} a_{i,\hat{j}} x_{\hat{j}} + \sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j^0 - b_i \right], \quad (2.31)$$

onde arbitrariamente \hat{j} correspondem aos índices para os quais $x_{\hat{j}}$ já tenham sido atualizados na iteração corrente e j corresponde aos índices ainda não atualizados. O pseudocódigo MP deste método pode ser descrito como segue:

1. Alocar a aproximação inicial x .
2. Para $t = 0, 1, 2, \dots, t_{\max}$:

- (a) $x^0 = x$.
- (b) *distribuição de laço em paralelo*:
 - i. Para $i = 0, 1, 2, \dots, n$:

$$A. \ x_i = -\frac{1}{a_{i,i}} \left[\sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j - b_i \right].$$

- (c) Verificar o critério de parada.

Este método tipo Gauss-Seidel converge mais rápido que o método de Jacobi em muitos casos. Veja [1, p. 151–153], para alguns resultados sobre convergência.

A implementação MP do pseudocódigo acima é apresentada no código abaixo. Os elementos dos vetores b , x^0 e da matriz A são inicializados da mesma forma que no código `pJacobi.cc` acima.

Código: `pGSL.cc`

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <time.h>
4
5 #include <gsl/gsl_matrix.h>
6 #include <gsl/gsl_vector.h>
7 #include <gsl/gsl_blas.h>
8 #include <gsl/gsl_rng.h>
9
10 // random +/- 1
11 double randsig(gsl_rng *rng);
12
13 int main(int argc, char *argv[]) {
14
15     int n = 999;
16     int tmax = 50;
17     double tol = 1e-8;
18
19     gsl_matrix *a = gsl_matrix_alloc(n,n);
20     gsl_vector *b = gsl_vector_alloc(n);
21
22     gsl_vector *x = gsl_vector_alloc(n);
```

```
23     gsl_vector *x0 = gsl_vector_alloc(n);
24
25     // gerador randômico
26     gsl_rng *rng = gsl_rng_alloc(gsl_rng_default);
27     gsl_rng_set(rng, time(NULL));
28
29     // Inicializacao
30     // Matriz estritamente diagonal dominante
31     printf("Inicializacao ... \n");
32     double sig;
33     for (int i=0; i<n; i++) {
34         double s = 0;
35         for (int j=0; j<n; j++) {
36             double aux = gsl_rng_uniform(rng);
37             gsl_matrix_set(a, i, j,
38                           randsig(rng)*aux);
39             s += aux;
40         }
41         gsl_matrix_set(a, i, i,
42                       randsig(rng) * s);
43         gsl_vector_set(b, i,
44                       randsig(rng) *
45                       gsl_rng_uniform(rng));
46         gsl_vector_set(x, i,
47                       randsig(rng) *
48                       gsl_rng_uniform(rng));
49     }
50     printf("feito.\n");
51
52     // Random Gauss-Seidel
53     for (int t=0; t<tmax; t++) {
54         gsl_vector_memcpy(x0, x);
55         #pragma omp parallel for
56         for (int i=0; i<n; i++) {
57             double s = 0;
58             for (int j=0; j<i; j++)
59                 s += gsl_matrix_get(a, i, j) *
60                     gsl_vector_get(x, j);
```

```
61     for (int j=i+1; j<n; j++)
62         s += gsl_matrix_get(a, i, j) *
63             gsl_vector_get(x, j);
64     gsl_vector_set(x, i,
65                     (gsl_vector_get(b, i) - s) /
66                     gsl_matrix_get(a, i, i));
67 }
68 // critério de parada
69 // ||x-x0||_2 < tol
70 gsl_blas_daxpy(-1.0, x, x0);
71 double e = gsl_blas_dnrm2(x0);
72 printf("Iter. %d: %1.0e\n", t, e);
73 if (e < tol)
74     break;
75 }
76
77 gsl_matrix_free(a);
78 gsl_vector_free(b);
79 gsl_vector_free(x);
80 gsl_vector_free(x0);
81 gsl_rng_free(rng);
82
83 return 0;
84 }
85
86 double randsig(gsl_rng *rng)
87 {
88     double signal = 1.0;
89     if (gsl_rng_uniform(rng) >= 0.5)
90         signal = -1.0;
91     return signal;
92 }
```

2.5.3 Método do Gradiente Conjugado

O Método do Gradiente Conjugado pode ser utilizado na resolução de sistemas lineares $Ax = b$, onde A é uma matriz simétrica e positiva definida.

No caso de sistemas em gerais, o método pode ser utilizado para resolver o sistema equivalente $A'Ax = A'b$, onde A é uma matriz inversível, com A' denotando a transposta de A .

O pseudocódigo deste método é apresentado como segue:

1. Alocar a aproximação inicial x .
2. Calcular o resíduo $r = Ax - b$.
3. Alocar a direção $d = r$.
4. Para $t = 0, 1, \dots, t_{\max}$:

$$(a) \quad \alpha = -\frac{r \cdot d}{d \cdot Ad}.$$

$$(b) \quad x = x + \alpha d.$$

$$(c) \quad r = Ax - b.$$

$$(d) \quad \beta = \frac{r \cdot Ad}{d \cdot Ad}.$$

$$(e) \quad d = -r + \beta d$$

Uma versão MP deste método pode ser implementada pela distribuição em paralelo de cada uma das operações de produto escalar, multiplicação matriz-vetor e soma vetor-vetor. O seguinte código é uma implementação MP do Método do Gradiente Conjugado. Os elementos do vetor b e da matriz A são inicializados de forma randômica e é garantida que matriz é simétrica positiva definida.

Código: pGC.cc

```
1 #include <omp.h>
2 #include <stdio.h>
3 #include <time.h>
4 #include <math.h>
5
6 #include <gsl/gsl_matrix.h>
7 #include <gsl/gsl_vector.h>
8 #include <gsl/gsl_blas.h>
9 #include <gsl/gsl_rng.h>
10
```

```
11 int n = 999;
12 int tmax = 50;
13 double tol = 1e-8;
14
15 // inicializacao
16 void init(gsl_matrix *a,
17           gsl_vector *b);
18
19 // random +/- 1
20 double randsig(gsl_rng *rng);
21
22 // residuo
23 void residuo(const gsl_matrix *a,
24              const gsl_vector *x,
25              const gsl_vector *b,
26              gsl_vector *r);
27
28 // Metodo do Gradiente Conjugado
29 void pGC(const gsl_matrix *a,
30          const gsl_vector *b,
31          gsl_vector *x);
32
33 int main(int argc, char *argv[]) {
34
35     // sistema
36     gsl_matrix *a = gsl_matrix_alloc(n,n);
37     gsl_vector *b = gsl_vector_alloc(n);
38
39     // incognita
40     gsl_vector *x = gsl_vector_alloc(n);
41
42     // inicializacao
43     init(a, b);
44
45     // Método do Gradiente Conjugado
46     pGC(a, b, x);
47
48     gsl_matrix_free(a);
```

```
49     gsl_vector_free(b);
50     gsl_vector_free(x);
51
52     return 0;
53 }
54
55 /*****
56 Inicializacao
57 *****/
58 void init(gsl_matrix *a,
59          gsl_vector *b)
60 {
61     printf("Inicializacao ... \n");
62     // gerador randômico
63     gsl_rng *rng = gsl_rng_alloc(gsl_rng_default);
64     gsl_rng_set(rng, time(NULL));
65
66     // C - Matriz estritamente diagonal positiva
67     double sig;
68     gsl_matrix *c = gsl_matrix_alloc(n,n);
69     #pragma omp parallel for
70     for (int i=0; i<n; i++) {
71         double aux;
72         double s = 0;
73         for (int j=0; j<n; j++) {
74             aux = gsl_rng_uniform(rng);
75             gsl_matrix_set(c, i, j,
76                           randsig(rng) * aux);
77             s += aux;
78         }
79         gsl_matrix_set(c, i, i,
80                       randsig(rng) * s);
81         gsl_vector_set(b, i,
82                       randsig(rng) *
83                       gsl_rng_uniform(rng));
84     }
85     // A = C'C: Simétrica positiva definida
86     #pragma omp parallel for
```

```

87     for (int i=0; i<n; i++)
88         for (int j=0; j<n; j++) {
89             double s;
90             gsl_vector_const_view ci =
91                 gsl_matrix_const_column(c, i);
92             gsl_vector_const_view cj =
93                 gsl_matrix_const_column(c, j);
94             gsl_blas_ddot(&ci.vector, &cj.vector, &s);
95             gsl_matrix_set(a, i, j, s);
96         }
97
98     gsl_rng_free(rng);
99     gsl_matrix_free(c);
100
101     printf("feito.\n");
102 }
103 /*****/
104
105 /*****/
106 Sinal randomico
107 *****/
108 double randsig(gsl_rng *rng)
109 {
110     double signal = 1.0;
111     if (gsl_rng_uniform(rng) >= 0.5)
112         signal = -1.0;
113     return signal;
114 }
115 /*****/
116
117 /*****/
118 residuo
119 *****/
120 void residuo(const gsl_matrix *a,
121             const gsl_vector *x,
122             const gsl_vector *b,
123             gsl_vector *r)
124 {

```

```
125     #pragma omp parallel for
126     for (int i=0; i<n; i++) {
127         double s = 0;
128         for (int j=0; j<n; j++)
129             s += gsl_matrix_get(a, i, j) *
130                 gsl_vector_get(x, j);
131         gsl_vector_set(r, i,
132                       s - gsl_vector_get(b, i));
133     }
134 }
135 /*****/
136
137 /*****/
138 Metodo do Gradiente Conjugado
139 *****/
140 void pGC(const gsl_matrix *a,
141         const gsl_vector *b,
142         gsl_vector *x)
143 {
144     gsl_vector *r = gsl_vector_alloc(n);
145     gsl_vector *d = gsl_vector_alloc(n);
146     gsl_vector *ad = gsl_vector_alloc(n);
147
148     // x = 0
149     gsl_vector_set_zero(x);
150
151     // r = Ax - b
152     residuo(a, x, b, r);
153
154     // d = r
155     gsl_vector_memcpy(d, r);
156
157     for (int t=0; t<tmax; t++) {
158         // r.d, Ad, dAd
159         double rd = 0;
160         double dAd = 0;
161         #pragma omp parallel for reduction(+:rd,dAd)
162         for (int i=0; i<n; i++) {
```

```
163     rd += gsl_vector_get(r, i) *
164         gsl_vector_get(d, i);
165     double adi = 0;
166     for (int j=0; j<n; j++)
167         adi += gsl_matrix_get(a, i, j) *
168             gsl_vector_get(d, j);
169     gsl_vector_set(ad, i, adi);
170     dAd += gsl_vector_get(d, i) * adi;
171 }
172
173 // alpha
174 double alpha = rd/dAd;
175
176 // x = x - alpha*d
177 #pragma omp parallel for
178 for (int i=0; i<n; i++)
179     gsl_vector_set(x, i,
180                    gsl_vector_get(x, i) -
181                    alpha *
182                    gsl_vector_get(d, i));
183
184 // residuo
185 residuo(a, x, b, r);
186
187 // rAd
188 double rAd = 0;
189 #pragma omp parallel for reduction(+:rAd)
190 for (int i=0; i<n; i++)
191     rAd += gsl_vector_get(r, i) *
192         gsl_vector_get(ad, i);
193
194 // beta
195 double beta = rAd/dAd;
196
197 // d
198 #pragma omp parallel for
199 for (int i=0; i<n; i++)
200     gsl_vector_set(d, i,
```

```

201         beta *
202         gsl_vector_get(d, i) -
203         gsl_vector_get(r, i));
204
205     // critério de parada
206     // ||r||_2 < tol
207     double crt = 0;
208     #pragma omp parallel for reduction(+: crt)
209     for (int i=0; i<n; i++)
210         crt += gsl_vector_get(r, i) *
211             gsl_vector_get(r, i);
212     crt = sqrt(crt);
213     printf("Iter. %d: %1.1e\n", t, crt);
214     if (crt < tol)
215         break;
216 }
217
218 gsl_vector_free(r);
219 gsl_vector_free(d);
220 gsl_vector_free(ad);
221
222 }
223 /*****

```

Exercícios Resolvidos

ER 2.5.1. Faça uma implementação MP para computar a inversa de uma matriz A usando o Método de Gauss-Seidel. Assuma que A seja uma matriz estritamente diagonal dominante de dimensões $n \times n$ (n grande).

Solução. A inversa da matriz A é a matriz B de dimensões $n \times n$ tal que

$$AB = I \quad (2.32)$$

Denotando por b_k , $k = 0, 1, \dots, n$, as colunas da matriz B , temos que o problema de calcular B é equivalente a resolver os seguintes n sistemas lineares

$$Ab_k = i_k, \quad k = 0, 1, \dots, n, \quad (2.33)$$

onde i_k é a k -ésima coluna da matriz identidade I . Podemos usar o método de Gauss-Seidel para computar a solução de cada um destes sistemas lineares. Embora o método não seja paralelizável, os sistemas são independentes um dos outros e podem ser computados em paralelo. O pseudocódigo pode ser escrito como segue:

1. Alocar a matriz A .
2. *(início da região paralela)*
 - (a) Para $k = 0, 1, \dots, n$ *(laço em paralelo)*:
 - i. Alocar i_k .
 - ii. Inicializar b_k .
 - iii. Resolver pelo Método de Gauss-Seidel

$$Ab_k = i_k \quad (2.34)$$

A implementação fica como Exercício E 2.5.2.

◇

ER 2.5.2. Faça uma implementação MP do método de sobre-relaxação de Jacobi (método JOR) para computar a solução de um sistema linear $Ax = b$, com A matriz estritamente diagonal dominante de dimensões $n \times n$ (n grande).

Solução. O método JOR é uma variante do método de Jacobi. A iteração JOR é

$$x_i(0) = \text{aprox. inicial}, \quad (2.35)$$

$$x_i(t+1) = (1 - \gamma)x_i(t) - \frac{\gamma}{a_{i,i}} \left[\sum_{j \neq i} a_{i,j}x_j(t) - b_i \right], \quad (2.36)$$

para cada $i = 0, 1, \dots, n-1$ e $t = 0, 1, 2, \dots$, com $0 < \gamma < 1$. Note que se $\gamma = 1$, então temos o Método de Jacobi.

A implementação MP do Método JOR pode ser feita de forma análoga a do Método de Jacobi (veja o código `pJacobi.cc` na Subseção 2.5.1). A implementação fica como exercício E 2.5.1.

◇

Exercícios

E 2.5.1. Complete o ER 2.5.2.

E 2.5.2. Complete o ER 2.5.1.

E 2.5.3. O Método de Richardson para o cálculo da solução de um sistema linear $Ax = b$ de dimensões $n \times n$ tem a seguinte iteração

$$x(0) = \text{aprox. inicial}, \quad (2.37)$$

$$x(t+1) = x(t) - \gamma [Ax(t) - b], \quad (2.38)$$

onde γ é um parâmetro escalar de relaxação e $t = 0, 1, 2, \dots$. Faça uma implementação MP deste método.

E 2.5.4. O Método das Sucessivas Sobre-relaxações (SOR) é uma variante do Método de Gauss-Seidel. A iteração SOR é

$$x_i(0) = \text{aprox. inicial}, \quad (2.39)$$

$$x_i(t+1) = (1 - \gamma)x_i(t) - \frac{\gamma}{a_{i,i}} \left[\sum_{j < i} a_{i,j}x_j(t+1) + \sum_{j > i} a_{i,j}x_j(t) - b_i \right], \quad (2.40)$$

onde $0 < \gamma < 1$, $i = 0, 1, \dots, n-1$ e $t = 0, 1, 2, \dots$.

Este método não é paralelizável, mas ele pode ser adaptado pela distribuição paralela do cálculo das incógnitas a cada iteração conforme o Método tipo Gauss-Seidel apresentado na Subseção 2.5.2. Faça a adaptação do Método SOR e implemente em MP.

E 2.5.5. Faça a implementação do método do Gradiente Conjugado para computar a inversa de uma matriz A simétrica positiva definida de dimensões $n \times n$ (n grande).

2.6 Métodos iterativos para problemas não lineares

Vamos considerar um sistema de equações não lineares

$$F(x) = 0, \quad (2.41)$$

onde $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ e $F : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$.

2.6.1 Método de Newton

Supondo que F é duas vezes diferenciável, a solução de (2.41) pode ser computada pela iteração de Newton:

$$x(0) = \text{aprox. inicial}, \quad (2.42)$$

$$x(t+1) = x(t) - \gamma J_F^{-1}(x(t)) F(x(t)), \quad (2.43)$$

onde $\gamma > 0$ é o tamanho do passo escolhido,

$$J_F(\cdot) = \left[\frac{\partial F_i}{\partial x_j}(\cdot) \right]_{i,j=1}^{n,n} \quad (2.44)$$

denota a jacobiana de F , e $t = 1, 2, 3, \dots$

Observamos que, em geral, a iterada de Newton (2.43) não é trivialmente paralelizável, devido a acoplamentos entre as n equações. Por outro lado, podemos reescrever (2.43) como segue:

$$x(t+1) = x(t) + \gamma s(t), \quad (2.45)$$

onde $s(t)$ é o passo de Newton, dado como a solução do seguinte sistema linear

$$J_F(x(t)) s(t) = -F(x(t)). \quad (2.46)$$

Desta forma, a cada iteração de Newton t , devemos computar a solução do sistema linear (2.46). A aplicação da paralelização no método de Newton dá-se pela utilização de métodos paralelizáveis para a resolução de sistemas lineares. Na Seção 2.4 e, principalmente, na Seção 2.5, discutimos sobre a paralelização de métodos para sistemas lineares.

No caso de um sistema de grande porte e uma vez computada $s(t)$, a atualização (2.45) também pode ser trivialmente paralelizada. Ainda, as computações da função objetivo F e de sua jacobiana J_F também são paralelizáveis.

2.6.2 Método do acorde

Em problemas de grande porte, o cálculo da jacobina J_F é, em muitos casos, o passo computacionalmente mais custoso na aplicação do método de Newton. Uma alternativa é o chamado método do acorde, no qual a jacobiana é

computada apenas na iteração inicial. Segue a iteração deste método

$$x(0) = \text{aprox. inicial}, \quad (2.47)$$

$$J_{F,0} = J_F(x(0)), \quad (2.48)$$

$$x(t+1) = x(t) + \gamma s(t), \quad (2.49)$$

$$J_{F,0}s(t) = -F(x(t)), \quad (2.50)$$

onde $t = 0, 1, 2, \dots$

Enquanto a taxa de convergência do método de Newton é quadrática, o método do acorde tem convergência linear. Portanto, este só é vantajoso quando o custo de computar a jacobiana é maior que o custo de se computar várias iterações a mais.

Além das paralelizações triviais na computação de (2.48) e (2.54), vamos observar a computação da direção $s(t)$ (2.55). Como a jacobiana $J_{F,0}$ é fixada constante, a utilização de métodos iterativos para computar $s(t)$ pode não ser o mais adequado. Aqui, a utilização de método direto, como a decomposição LU torna-se uma opção a ser considerada. Neste caso, a iteração ficaria como segue

$$x(0) = \text{aprox. inicial}, \quad (2.51)$$

$$J_{F,0} = J_F(x(0)), \quad (2.52)$$

$$LU = J_{F,0}, \quad (2.53)$$

$$x(t+1) = x(t) + \gamma s(t), \quad (2.54)$$

$$LU s(t) = -F(x(t)), \quad (2.55)$$

onde $t = 0, 1, 2, \dots$

2.6.3 Métodos *quasi*-Newton

Baseados em aproximações na computação do passo de Newton

$$J_F(x(t))s(t) = -F(x(t)), \quad (2.56)$$

uma série de métodos *quasi*-Newton são derivados. A aplicação de cada uma dessas tais variantes precisa ser avaliada caso a caso. Em todas elas, busca-se abrir mão da convergência quadrática em troca de um grande ganho no tempo computacional em se computar $s(t)$.

Uma das alternativas é uma variante do método do acorde. A ideia é estimar a taxa de convergência p entre as iterações e atualizar a jacobiana quando a taxa estimada é menor que um certo limiar p_l considerado adequado (este limiar pode ser escolhido com base nos custos computacionais de se recomputar a jacobiana *versus* o de se computar várias iterações a mais). A convergência é da ordem p quando

$$\|F(x(t+1))\| \approx K \|F(F(x(t)))\|^p, \quad (2.57)$$

com $K > 0$, $\|F(x(t))\| \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. Assim sendo, é razoável esperar que

$$p \approx \frac{\log(\|F(x(t+1))\|)}{\log(\|F(x(t))\|)} \quad (2.58)$$

. Com isso, o pseudocódigo segue

1. Aproximação inicial: $x(0)$, $t = 0$.
2. Jacobiana: $J_F = J_F(x(t))$.
3. Enquanto $\|F(x(t))\| > tol$:
 - (a) $J_F s(t) = -F(x(t))$.
 - (b) $x(t+1) = x(t) + \gamma s(t)$.
 - (c) $p = \log(\|F(x(t+1))\|) / \log(\|F(x(t))\|)$
 - (d) Se $p < p_l$, então:
 - i. $J_F = J_F(x(t+1))$.
 - (e) $t = t + 1$.

Outra alternativa que pode ser considerada em determinados casos, é a de se computar $s(t)$ por

$$J_F(x(t)) s(t) = -F(x(t)) \quad (2.59)$$

de forma aproximada. No contexto de métodos iterativos para sistemas lineares, pode-se truncar a resolução do sistema acima fixando um número pequeno de iterações. Desta forma, $s(t)$ não seria computada de forma precisa, mas a aproximação computada pode ser suficientemente adequada. Do ponto de vista de paralelização em MP, estas variantes do método de Newton apresentam potenciais e requerem cuidados similares ao método original.

Exercícios

E 2.6.1. Implemente um código MP para computar a solução de

$$\sin(x_1 x_2) - 2x_2 - x_1 = -4.2 \quad (2.60)$$

$$3e^{2x_1} - 6ex_2^2 - 2x_1 = -1 \quad (2.61)$$

usando o método de Newton. Use a inversa da jacobiana exata e aproximação inicial $x(0) = (2, 2)$.

E 2.6.2. Considere o seguinte problema de Poisson não-linear

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + u^2) \frac{\partial u}{\partial x} \right] = \cos(\pi x), \quad x \in (-1, 1), \quad (2.62)$$

$$u(0) = 1, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=1} = 0. \quad (2.63)$$

Use o método de diferenças finitas para discretizar este problema de forma a aproximá-lo como um sistema algébrico de equações não lineares. Implemente um código MP para computar a solução do sistema resultante aplicando o método de Newton.

E 2.6.3. No Exercício 2.6.2, faça uma implementação MP do método do acorde e compare com o método de Newton clássico.

E 2.6.4. No Exercício 2.6.2, faça uma implementação MP da variante do método do acorde com atualização da jacobiana com base na estimativa da taxa de convergência.

Capítulo 3

Computação paralela e distribuída (MPI)

Neste capítulo, vamos estudar aplicações da computação paralela em arquitetura de memória distribuída. Para tanto, vamos utilizar códigos C/C++ com a API [Open MPI](#).

3.1 Olá, Mundo!

A computação paralela com MPI inicia-se simultaneamente com múltiplos processadores (instâncias de processamento), cada um utilizando seu próprio endereço de memória (memória distribuída). Cada processo lê e escreve em seu próprio endereço de memória privada. Observamos que o processamento já inicia-se ramificado e distribuído, sendo possível a comunicação entre os processos por instruções explícitas (instruções MPI, *Message Passing Interface*). A sincronização entre os processos também requer instruções específicas.

Vamos escrever nosso primeiro código MPI. O Código `ola.cc` é paralelamente executado por diferentes processadores, cada processo escreve “Olá” e identifica-se.

Código: `ola.cc`

```
1 #include <stdio.h>
2
3 // API MPI
4 #include <mpi.h>
```

```
5
6 int main(int argc, char** argv) {
7     // Inicializa o MPI
8     MPI_Init(NULL, NULL);
9
10    // número total de processos
11    int world_size;
12    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &world_size);
13
14    // ID (rank) do processo
15    int world_rank;
16    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &world_rank);
17
18    // Escreve mensagem
19    printf("Olá! Eu sou o processo %d/%d.\n",
20           world_rank, world_size);
21
22    // Finaliza o MPI
23    MPI_Finalize();
24
25    return 0;
26 }
```

Na linha 3, o API MPI é incluído no código. O ambiente MPI é inicializado na linha 8 com a rotina `MPI_Init` inicializa o ambiente MPI. Na inicialização, o comunicador `MPI_COMM_WORLD` é construído entre todos os processos inicializados e um identificador (*rank*) é atribuído a cada processo. O número total de processos é obtido com a rotina `MPI_Comm_size`. Cada processo é identificado por um número natural sequencial 0, 1, ..., `world_size-1`. O id (*rank*) de um processo é obtido com a rotina `MPI_Comm_rank` (veja a linha 16). A rotina `MPI_Finalize` finaliza o ambiente MPI.

Para compilar este código, digite no terminal

```
$ mpic++ ola.cc
```

Esta instrução de compilação é análoga a

```
g++ ola.cc -I/usr/lib/x86_64-linux-gnu/openmpi/include/openmpi -I/usr/lib/x86_
```

ou semelhante dependendo da instalação. Para ver a sua configuração, digite

```
$ mpic++ ola.cc --showme
```

Ao compilar, um executável `a.out` será criado. Para executá-lo, basta digitar no terminal:

```
$ mpirun -np 2 a.out
```

Esta instrução inicializa simultaneamente duas cópias (`-np 2`, dois processos) do código `ola.cc` (do executável `a.out`). Cada processo é executado de forma independente (em paralelo e não sincronizados).

Ao executar, devemos ver a saída do terminal como algo parecido com

```
Olá! Eu sou o processo 1/2.
```

```
Olá! Eu sou o processo 0/2.
```

A saída irá variar conforme o processo que primeiro enviar a mensagem para o dispositivo de saída. Execute o código várias vezes e analise as saídas!

Exercícios resolvidos

ER 3.1.1. O número de instâncias de processamento pode ser alterado diretamente na instrução `mpirun` pela opção `-np`. Altere o número de instâncias de processamento para 4 e execute o Código `ola.cc`.

Solução. Para alterar o número de instâncias de processamento não é necessário recompilar o código¹. Basta executá-lo com o comando

```
$ mpirun -np 4 ./a.out
```

A saída deve ser algo do tipo

```
Olá! Eu sou o processo 1/4.
```

```
Olá! Eu sou o processo 3/4.
```

```
Olá! Eu sou o processo 2/4.
```

```
Olá! Eu sou o processo 0/4.
```

Execute o código várias vezes e analise as saídas!

◇

¹Caso ainda não tenha compilado o código, compile-o.

ER 3.1.2. Escreva um código MPI para ser executado com 2 instâncias de processamento. Cada processo recebe os números inteiros

```
int n = 2;  
int m = 3;
```

Então, um dos processos deve escrever a soma $n + m$ e o outro deve escrever o produto.

Solução. O código abaixo contém uma implementação deste exercício. Veja os comentários abaixo.

Código: sp.cc

```
1 #include <stdio.h>  
2 #include <assert.h>  
3  
4 // API MPI  
5 #include <mpi.h>  
6  
7 int main(int argc, char** argv) {  
8     // Inicializa o MPI  
9     MPI_Init(NULL, NULL);  
10  
11     // número total de processos  
12     int world_size;  
13     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &world_size);  
14  
15     // verifica o num. de processos  
16     if (world_size != 2) {  
17         printf("ERRO! Número de processos "  
18             "deve ser igual 2.\n");  
19         int errorcode=-1;  
20         MPI_Abort(MPI_COMM_WORLD, errorcode);  
21     }  
22  
23     // ID (rank) do processo  
24     int world_rank;  
25     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &world_rank);  
26
```

```
27     int n = 2;
28     int m = 3;
29
30     if (world_rank == 0)
31         printf("n+m = %d\n", n+m);
32     else if (world_rank == 1)
33         printf("n*m = %d\n", n*m);
34
35     // Finaliza o MPI
36     MPI_Finalize();
37
38     return 0;
39 }
```

Neste código, os processos são abortados caso o usuário tente executá-lo com um número de processos diferente de 2. Para abortar todos os processos ativos, utiliza-se a rotina [MPI_Abort](#) (veja as linhas 15-21). O argumento de entrada `errorcode` é arbitrário e serve para informar o usuário de uma categoria de erros conforme a política de programação utilizada. Observamos que o controle do que cada processo deve fazer, é feito através de sua identificação `world_rank` (veja as linhas 30-33).

◇

Exercícios

E 3.1.1. Rode o Código `ola.cc` com um número de processadores (*core*) maior do que o disponível em sua máquina. O que você observa? Modifique a instrução `mpirun` para aceitar a execução confirme o número de *threads* disponível na máquina. Por fim, modifique a instrução de forma a aceitar um número arbitrário de instâncias de processamento.

E 3.1.2. Faça um código MPI para ser executado com 2 instâncias de processamento. Uma das instâncias de processamento deve alocar

```
int a = 2;
int b = 3;
```

e escrever a diferença $a - b$. A outra instância deve alocar

```
int a = 4;
```

```
int b = 5;
```

e escrever o quociente b/a .

Resposta dos Exercícios

Referências Bibliográficas

- [1] D.P. Dimitri and J.N. Tsitsiklis. *Parallel and Distributed Computation: Numerical Methods*. Athena Scientific, 2015.
- [2] A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, and V. Kumar. *Introduction to Parallel Computing*. Addison Wesley, 2. edition, 2003.