

# 并行程序开发工具与高性能程序库

崔 涛

[tcui@lsec.cc.ac.cn](mailto:tcui@lsec.cc.ac.cn)

中国科学院数学与系统科学研究院



- Netlib is a collection of mathematical software, papers, and databases.

<http://www.netlib.org>

- 基础数学软件库: BLAS、LAPACK、ScaLAPACK, FFTW
- 网格生成: Tetgen、Netgen
- 并行图剖分: METIS/ParMETIS
- 线性方程组求解:
  - 直接法: PARDISO、MUMPS、SuperLU、SPOOLES、SuiteSparse等
  - 迭代法: PETSc、Hypre、Trilinos等
- 矩阵特征值计算: ARPACK/PARPACK、SLEPc、BLOPEX、JDBSYM等

BLAS (Basic Linear Algebra Subroutines) 是一组高质量的基本向量、矩阵运算子程序。最早的BLAS 是一组Fortran 函数和子程序，后来又发展了其他语言接口，包括C、Java 等。BLAS 的官方网址在<http://www.netlib.org/blas/> 国内镜像为<http://netlib.amss.ac.cn/blas/>。

对于BLAS库，现在有多种不同的优化实现，适用于Intel/Linux 平台的主要有以下几种：

- BLAS 参考实现这是一组标准Fortran 子程序，可以从BLAS 的主页下载：

<http://www.netlib.org/blas/index.html>;

- ATLAS 库(Automatically Tuned Linear Algebra Software): 它可以在不同平台上自动生成优化的BLAS 库，其主页为

<http://math-atlas.sourceforge.net/>;

- Goto 库: Kazushige Goto 开发的一套高性能BLAS 库, 其主页为  
`http://www.cs.utexas.edu/users/flame/goto/`;
- MKL 库(Math Kernel Library):Intel 为自己的CPU 专门优化的基本数学运算库, 其中包含BLAS 库.

`https://software.intel.com/zh-cn/non-commercial-software-development`

BLAS 从结构上分成三个层次:

- ① Level 1 BLAS: 向量和向量,向量和标量间的运算
- ② Level 2 BLAS: 向量和矩阵间的运算
- ③ Level 3 BLAS: 矩阵和矩阵间的运算

BLAS 的子程序命名规则:

D	GE	MM
浮点数类型	矩阵类型	运算类型

- 浮点数类型: S 为单精度实数、D 为双精度实数、C 为单精度复数、Z 为双精度复数。
- 运算类型: MV 表示矩阵乘向量, R 表示秩1 修正, R2 表示秩2 修正, SV 表示解线性方程组, SM 表示解(三角) 方程。

LAPACK (Linear Algebra PACKage) 是由Argonne 国家实验室、Courant 研究院和NAG (Numerical Algorithms Group) 公司联合开发完成的线性代数函数库。LAPACK 包含了求解科学与工程计算中最常见的数值线性代数计算问题，如线性方程组、线性最小二乘问题、特征值问题和奇异值问题等。LAPACK 还可以实现矩阵分解和条件数估计等相关计算。LAPACK 的网址在<http://www.netlib.org/lapack/>

在LAPACK 软件包中，其子程序可以分为三类。它们是

- 驱动程序(driver routines): 用于解决一个完整问题，例如线性方程组求解，QR 分解，或求一个实对称矩阵的特征值等。
- 计算程序(computational routines): 也叫作简单LAPACK 子程序，用以完成一个特定的计算任务，例如一个 $m$  阶矩阵的LU 分解，或把一个普通实矩阵化简为上Hessenberg 型。
- 辅助程序(auxiliary routines): 是被驱动程序和计算程序调用的子程序。这些程序主要完成对子块的操作和一些常用的底层计算。例如生成初等Householder 矩阵和计算矩阵范数等。

LAPACK 的所有驱动和计算程序命名规则:

<b>X</b>	<b>YY</b>	<b>ZZZ</b>
浮点数类型	矩阵类型	运算类型

辅助程序名除第2 个和第3 个字母通常是LA。

例子程序:

```
ftp://ftp.cc.ac.cn/pub/zlb/bxjsbook/code/
```

ScaLAPACK (Scalable LAPACK) 是美国能源部DOE2000 支持开发的20 多个ACTS 工具箱之一，由Oak Ridge 国家实验室、加州大学Berkeley分校和Illinois大学等联合开发。它是LAPACK在分布式存储环境中的扩展，主要运行在基于分布式存储和消息传递机制的MIMD计算机以及支持PVM或MPI的机群。ScaLAPACK 可以求解线性方程组、线性最小二乘问题、特征值和奇异值问题。同时它也可以处理许多相关问题，如矩阵分解和估计条件数。它只适用于稠密矩阵和带状矩阵，对于普通稀疏矩阵不适用。ScaLAPACK 的网站为

<http://www.netlib.org/scalapack>

ScaLAPACK 的基本组成部分是:

- PBLAS 是1、2、3 级BLAS 的分布式存储版本;
- BLACS负责实现并行线性代数计算中常用的通信。



ScaLAPACK 的程序等级、命名规则与LAPACK类似。对于与LAPACK相对应的ScaLAPACK 程序的名称，只是简单地在LAPACK 名称前面加一个P。

ScaLAPACK程序介绍：

- 驱动程序：线性方程组求解
- 驱动程序：线性最小二乘问题
- 驱动程序：标准特征值和奇异值问题
- 驱动程序：广义对称正定特征值问题(GSEP)
- 计算程序：求解线性方程组
- 计算程序：正交分解和最小二乘问题
- 计算程序：广义正交分解
- 计算程序：对称特征值问题
- 计算程序：非对称特征值问题
- 计算程序：奇异值分解

# ScaLAPACK III

- 计算程序: 广义对称正定特征值问题
- 数据分布: ScaLAPACK 要求所有全局数据(向量或矩阵) 在调用ScaLAPACK 程序前被分布到相关进程上。ScaLAPACK 采用块划分算法

调用ScaLAPACK 程序:

**初始化进程网络** 调用ScaLAPACK TOOLS 程序SL\_INIT 初始化进程网络。这个程序使用进程行优先排序初始化一个 $P_r \times P_c$  (在源代码中以 $NPROW \times NPCOL$  表示) 进程网络, 得到默认的系统上下文

**将矩阵分布到进程网络上** 在调用ScaLAPACK 程序之前所有全局矩阵必须分布在进程网络上。执行数据分布是用户的责任。每个要分布在进程网络上的全局矩阵都必须分配一个数组描述符, 数组描述符通过调用ScaLAPACK TOOLS 的程序DESCINIT 可以很简单地初始化, 它必须在调用ScaLAPACK 程序之前设置。

**调用ScaLAPACK 程序** 当数据正确分布到进程网格上之后，用户就可以调用相应的驱动、计算、辅助程序进行需要的计算。

**释放进程网络** 在进程网格上执行完计算后，通过调用BLACS\_GRIDEXIT释放进程网格。

使用ScaLAPACK 获得高性能的原则

- 使用正确数量的进程。
- 使用高效的数据分布。
- 使用对于特定平台优化的BLAS 和BLACS 库。

## 网格生成工具

- 串行软件:

- Netgen: <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>
- Tetgen: <http://tetgen.berlios.de>

- 并行软件: 研制中

## Example

### 格式转换

- Netgen: ▶ 输入文件 ▶ 格式转换工具
- Tetgen: ▶ 输入文件 ▶ 格式转换工具

## 网格生成工具

- 串行软件:
  - Netgen: <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>
  - Tetgen: <http://tetgen.berlios.de>
- 并行软件: 研制中

## Example

### 格式转换

- Netgen: ▶ 输入文件 ▶ 格式转换工具
- Tetgen: ▶ 输入文件 ▶ 格式转换工具

# 开源网格生成工具介绍

## 网格生成工具

- 串行软件:
  - Netgen: <http://www.hpfem.jku.at/netgen/>
  - Tetgen: <http://tetgen.berlios.de>
- 并行软件: 研制中

## Example

### 格式转换

- Netgen:
- Tetgen:

- ParMETIS: 并行图划分和填充-约化矩阵排序(Parallel Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering)，特别适合于大规模无结构网格的并行数值模拟。
- ParMETIS基于MPI并行库，实现了用于无结构图划分、网格划分、计算稀疏矩阵的填充-约化次序等多种算法。
- ParMETIS扩展了METIS所提供的功能并包含了特别适合于并行计算和大规模数值模拟的子程序。
- ParMETIS中实现的算法基于并行多层k-路图划分算法、自适应再划分算法及并行多约束算法。

主要功能包括:

- 图划分
  - 快速计算非常大规模图的高质量划分;
  - 利用几何信息(当可用时) 降低划分时间而不损失质量;
  - 可为多相及多物理计算划分图。

# ParMETIS II

- 图划分的并行子程序ParMETIS\_V3\_PartKway基于串行多层k-路分区算法。当顶点坐标可用时，PARMETIS也为非结构图划分提供了ParMETIS\_PartGeom函数。ParMETIS\_PartGeom仅基于空间填充曲线方法计算一个分区。
- 网格划分
  - ParMETIS\_V3\_PartMeshKway: 由网格（而不是图）作为输入的划分和重划分计算。
  - ParMETIS\_V3\_Mesh2Dual, 用来快速、并行地为一个给定的网格构造一个偶图（dual graph）。
- 图重划分和划分加细
  - 快速计算自适应加密网格的高质量再划分；
  - 优化移去的顶点个数以及所得划分的边切割。
  - 改进由其它划分算法产生的划分的质量。
  - ParMETIS\_V3\_AdaptiveRepart子程序假设网格已很好地分布在各处理器，但存在着不好的负载平衡。
  - ParMETIS\_V3\_RefineKway 假设图已很好地分布，并且初始划分有好的平衡。



- 矩阵重排序
  - 计算稀疏矩阵的填充-约化(fill-reducing)次序;
  - 使用基于节点的嵌套剖分算法, 此算法显示比其它流行重排序算法更优越。
  - **ParMETIS\_V3\_NodeND**对图初始如何分布在各处理器没用要求。它能有效地随机分布图的填充-约化次序。

Hypre (High Performance Preconditioners, 高性能预条件子) 源于美国能源部和LLNL等在研究国防、环境、能源和生物科学中的物理现象时, 开发的一些模拟代码。主要用于大规模并行计算机上求解大型稀疏线性方程组, 目的是为用户提供高级并行预条件子, 主页地址为:

<http://acts.nersc.gov/hypre/>

Hypre具有强壮性、易用性、适应性和互动性, 其主要特性为:

- 可扩展的预条件子: 包括诸如结构化多重网格 (SMG) 和代数多重网格 (AMG) 等几类可扩展求解超大规模稀疏线性方程组的预条件子算法。
- 常用的迭代法实现: Hypre提供一些最常用的基于Krylov子空间迭代法。比如求解非对称矩阵的GMRES和求解对称矩阵的CG (包括PCG, CGNR, BiCGStab)。

- 直观的以网格为中心的界面：Hypre通过各种网格界面表示和处理稀疏矩阵，每个界面提供对一些求解器的访问，因此不需要用户去学习和创建复杂的数据结构。

迭代方法包括：

- Krylov解法器（CG，GMRES(缺省情形)，TFQMR，BiCGSTAB）；
- BoomerAMG（一个并行代数多重网格解法器）；
- 具有迭代加细(refinement)的SuperLU直接解法器。

预条件子：

- Diagonal：对角，块Jacobi预条件子(缺省情形)；
- PILUT：具有阈值(threshold)的并行不完全LU分解(PILU)；
- Euclid：一种扩展性能较好的并行不完全LU分解(ILU)预条件子；

# Hypre III

- SMG: 半粗化 (semi-coarsening) 多重网格预条件子; 二维和三维情形的光滑子(smoother)分别采用线松弛和面松弛
- PFMG: 半粗化多重网格预条件子, 使用简单点松弛作为光滑子;
- BoomerAMG: 并行代数多重网格 (AMG) 预条件子; 用户可选择不同的并行粗化策略及松弛格式光滑子.
- ParaSails: 并行稀疏近似逆预条件子

多重网格解法器是HYPRE的重要特色. 多重网格方法包含三个要素:

- 光滑算子: 松弛迭代(如Gauss-Seidel、SSOR)等简单迭代
- 限制算子: 相邻点的加权平均作为限制
- 延拓算子: 分片线性插值作为延拓

HYPRE提供多个多重网格解法器如AMS, SMG, PFMG, MLI, BoomerAMG. 这些可满足各种应用的需求. 其中SMG和BoomerAMG是目前实际应用中使用的最广泛的两个解法器.

- SMG求解矩形网格下对流扩散方程的FDM, FEM或FVM离散得到的方程组。二维时SMG只在x方向半粗化, 在y方向用的是线光滑, 三维时则采用面光滑。而PFMG仅使用简单的点光滑, 因此PFMG的健壮性不如SMG, 但是它在作V-循环迭代时效率更高。
- BoomerAMG既可作为迭代法, 也可作为预条件子。用户可以根据情况选择不同的并行粗化技巧(比如CLJP粗化、经典RS粗化)和松弛策略(比如Gauss-Seidel松弛、Jacobi或加权Jacobi松弛)。

MUMPS: 多波前大规模并行稀疏直接解法器 (A MUltifrontal Massively Parallel sparse direct Solver) 基于多波前方法的直接求解方法的并行软件包, 通过将矩阵A直接分解为  $A = LU$  或  $A = LDLT$  形式完成并行大规模线性方程的求解, 其中A是一个对称或非对称的稀疏方阵。  
主页地址:

<http://mumps.enseeiht.fr/>

矩阵类型在初始化阶段 (JOB=-1) 由所有进程通过参数 `mumps par%SYM` 设定:

- 0: A是非对称型
- 1: A是对称正定型
- 3: A是一般对称矩阵

MUMPS提供了多种矩阵输入格式, 这些由参数 `ICNTL(5)` 和 `ICNTL(18)` 控制。

- 单元格式：矩阵由主进程(host)集中输入，置ICNTL(5)=1 ICNTL(18)=0
- 组装格式（assembled format）
  - 矩阵由主进程(host)集中输入，置ICNTL(5)=0 ICNTL(18)=0
  - 元素被分布到各处理器上，置ICNTL(5)=0 ICNTL(18)≠0

PETSC: 并行可扩展科学计算工具箱 (Parallel Extensible Toolkits for Scientific Computing)

- 国能源部ODE2000 支持开发的20 多个ACTS 工具箱之一，由Argonne 国家实验室开发的可移植可扩展科学计算工具箱，主要用于在分布式存储环境高效求解偏微分方程组及相关问题。
- 提供大量面向对象的并行代数数据结构、解法器和相关辅助部件，适合并行可扩展求解PDE方程（有限差分、有限元、有限体离散的隐式和显示格式）。
- 基于MPI、BLAS库、LAPACK库,部分功能支持GPU。
- 使用Fortran、C/C++开发
- 主页地址:

<http://www.mcs.anl.gov/petsc/>



# PETSC II

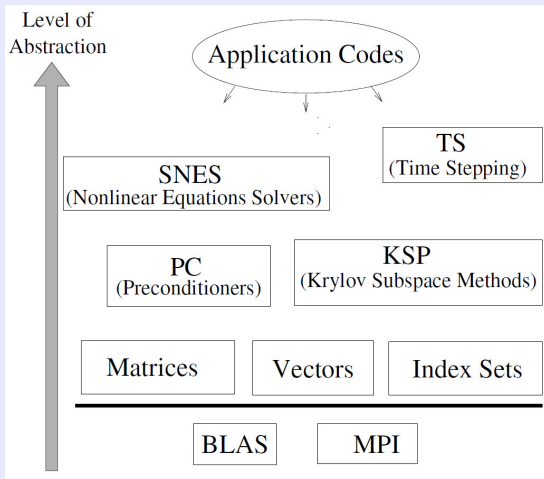


Figure : PETSC的层次结构

# PETSC III

和MPI程序一样,在调用Petsc函数之前必须完成初始化工作,一般情况下是调用:

```
int PetscInitialize (int *argc,char ***args,
                    char *file,char *help)
```

该函数完成了初始化PETSC database和MPI环境的工作。它会自动检测程序是否已经调用了MPI\_Init(),如果没有,便调用MPI\_Init()。通常情况下最好将PetscInitialize()放在程序代码最开始。

在所有工作完成后,在程序的最后应该调用int PetscFinalize()该函数主要是调用了MPI\_Finalize()。一个典型的PETSC程序应该是

```
#include "petsc.h"
int main(int argc,char **args)
{
    PetscInitialize(&argc,&args,(char *)0,help);
    . . . . .
```

```
.. .. ..  
.. .. ..  
PetscFinalize();  
return 0;  
}
```

详细内容参考: 用户手册和 [pets\\_note.pdf](#)

PARPACK是ARPACK软件包的并行版本。ARPACK是一个用来求解大规模特征问题的软件包，它本身是一个Fortran77子程序集合。由于采用基于消息传递的并行编程模型，使得PARPACK软件包具有较好的可以移植性。通过PARPACK/ARPACK软件包，用户可解决来自重大应用领域内的大规模对称、非对称(包括Hermiton、non-Hermiton)和广义特征值问题。PARPACK/ARPACK软件包是基于隐式重启Arnoldi/Lanczos方法（IRAM: Implicitly Restarted Arnoldi/ Lanczos method）的实现。Arnoldi/Lanczos是一个用来求解大规模 $n \times n$ 矩阵几个端特征值的重要方法，特别适合于大规模稀疏或结构矩阵的特征问题的求解。

## PARPACK/ARPACK主要特性

- 存储开销低: 对大规模问题，存储需求将成为用户使用软件时的一个重要考虑。该软件包通过使用隐式重启Lanczos/Arnoldi（Implicit Restarting Lanczos/Arnoldi）方法克服了原始Lanczos/Arnoldi方法太高的存储需求。

# PARPACK II

- 逆向通信接口(Reverse Communication Interface): 逆向通信接口为用户使用ARPACK/PARPACK 软件包提供了极大灵活性, 这也是该软件的重要特性。该软件为不同应用类型提供了相应的逆通信接口子程序。逆通信接口采用循环结构, 它使得矩阵的存储格式和矩阵-向量乘积的选择更为灵活, 同时也有利于PARPACK代码的并行化实现。
- 简单易用的驱动程序: PARPACK为求解不同类型矩阵的特征问题提供了相应的驱动程序, 这些驱动程序可以被用户用做模板, 通过适当的修改作为求解具体特征问题的程序。这些驱动程序包括:

```
nonsym : psndrv1.f psndrv3.f  pdndrv1.f pdndrv3.f  
sym    : pssdrv1.f pdsdrv1.f  
complex : pcndrv1.f pzndrv1.f
```

- 数值稳定、求解效率和精度高: 所计算特征值和特征向量的数值精度可由用户自由指定, 且求解精度同隐式位移QR迭代一致, 提供了各种谱变换用来加速收敛速度和求解广义特征问题; 充分考虑奇异和病态问题。