

Решение системы линейных уравнений блочным методом Холецкого

Бобровников М. Р.

1 Постановка задачи

Задача. Найти решение системы линейных уравнений $Ax = b$. Где A — симметричная вещественнозначная матрицы размера $n \times n$, b — известный вектор размера n и x — неизвестный вектор. Искать решение будем с помощью разложения Холецкого матрицы $A = R^T DR$. Далее найдем такое y , что $R^T y = b$. Затем найдем x из условия $DRx = y$. Здесь R — верхнетреугольная матрица, D — диагональная матрица с 1 или -1 на диагонали.

Теорема. Пусть матрица A — самосопряженная и все ее угловые миноры отличны от нуля. Тогда существует матрица $R = (r_{ij}) \in RT(n)$ с вещественными положительными элементами на главной диагонали и диагональная матрица D с вещественными равными по модулю единице диагональными элементами такие, что $A = R^T DR$.

Решение задачи. Применим точечный метод Холецкого для поиска матрицы R . Элементы d_{ii} , r_{ii} , r_{ij} могут быть вычислены по следующим формулам:

$$\begin{aligned} d_{ii} &= \operatorname{sgn}(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} |r_{ki}|^2 d_{kk}), \quad i = 1, \dots, n, \\ r_{ii} &= \sqrt{|a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} |r_{ki}|^2 d_{kk}|}, \quad i = 1, \dots, n, \\ r_{ij} &= (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki} d_{kk} r_{kj}) / (r_{ii} d_{ii}), \quad i < j, \quad i, j = 1, \dots, n, \end{aligned} \tag{1}$$

□

2 Оценка сложности в алгоритме построения верхнетреугольной матрицы в разложении Холецкого

Из формул (1) следует, что для вычисления элемента d_{ii} , $i = 1, \dots, n$ требуется $i - 1$ мультипликативных и столько же аддитивных операций. Следовательно, вычисление всех элементов матрицы D требует $\sum_{i=1}^n (i - 1) = n(n - 1)/2 = O(n^2)$ мультипликативных и столько аддитивных операций.

При фиксированном $i = 1, \dots, n$ вычисление элементов r_{ij} для всех $j = i + 1, \dots, n$ по формулам (1) требует $1 + \sum_{j=i+1}^n (i - 1) = (n - i)(i - 1) + 1$ мультипликативных и $\sum_{j=i+1}^n (i - 1) = (n - i)(i - 1)$ аддитивных операций. Следовательно, вычисление всех элементов матрицы R требует n операций извлечения корня, $\sum_{i=1}^n ((n - i)(i - 1) + (i - 1) + 1) = n^3/6 + O(n^2)$ ($n \rightarrow \infty$) мультипликативных и $\sum_{i=1}^n ((n - i)(i - 1) + (i - 1)) = n^3/6 + O(n^2)$ ($n \rightarrow \infty$) аддитивных операций. Таким образом нахождение матрицы R требует $n^3/3 + O(n^2)$ ($n \rightarrow \infty$) арифметических операций.

3 Описание блочного метода Холецкого

Разобьем матрицу A на блоки размера $m \times m$. Из формулы $A = R^T D R$ ясно, что формулы для нахождения блоков матрицы R имеют вид:

$$(R_{ii}, D_i) = \text{decomp}(A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} R_{ki}^T D_k R_{ki}), \quad i = 1, \dots, n, \quad (2)$$

$$R_{ij} = D_i^{-1} (R_{ii}^T)^{-1} (A_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} R_{ki}^T D_k R_{kj}), \quad i < j, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

Здесь $\text{decomp}(U)$ — функция, которая вычисляет разложение Холецкого симметричной матрицы U . Из формул (2) видно, что для вычислений не нужно хранить дополнительные матрицы, кроме как одну — для сохранения результата нахождения R_{ii}^{-1} . Результирующие матрицы D_i, R_{ii}, R_{ij} можно хранить прямо на месте A и D .

3.1 Оценка сложности в алгоритме построения верхнетреугольной матрицы в блочном разложении Холецкого

Пусть $N = n/m$ (т. е. количество блоков в строке и столбце матрицы), а m нацело делит n . Сначала подсчитаем количество операций, требуемых для вычисления диагональных блоков R_{ii} . Пусть сложность вычисления произведения матриц $\text{Mult}(n) = 2n^3 - n^2$. Сложность разложения Холецкого $\text{Chol}(n) = n^3/3$. Тогда сложность вычисления блока R_{ii} : $(i-1)\text{Mult}(m) + \text{Chol}(m)$

Сложность вычисления всех диагональных блоков $R_{ii}, i \in 1, \dots, N$:

$$S_1(n, m) = \sum_{i=1}^N ((i-1)\text{Mult}(m) + \text{Chol}(m)) = n^2 m - n^2/2 - 2/3 nm^2 + nm/2$$

Найдем сложность вычисления всех блоков, стоящих над диагональю. Для вычисления $R_{ki}^T D_k R_{kj}$ требуется $\text{Mult}(m)$ операций. Для вычисления $A_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} R_{ki}^T D_k R_{kj}$ требуется $W(i, m) = \sum_{k=1}^{i-1} (\text{Mult}(m) + m^2)$ операций, т.к. на каждом шаге нужно перемножить и вычитать матрицы. Умножение на треугольную матрицу требует $Y(n) = n^3$ операций. Вычисление R_{ij} : $R(i, m) = W(i, m) + Y(m) = 2im^3 - m^3 - m^2$. Тогда

$$S_1(n, m) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N R(i, m) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N (2im^3 - m^3 - m^2) = 1/6 n(n-m)(2n-m-3)$$

Чтобы $(N-1)$ раз найти обратную к верхнетреугольной: $S_3(n, m) = (N-1)m^3/3 = (n-m)m^2/3$

Итак, нахождение всех блоков R_{ij} требует

$$S(n, m) = S_1 + S_2 + S_3 = n^3/3 - m^2 n^2/6 + 2/3 mn^2 - n^2 + m^3 n/6 - m^2 n/3 + mn - m^3/3$$

$$S(n, n) = n^3/3$$

$$S(n, 1) = n^3/3 + O(n^2), \quad (n \rightarrow \infty)$$

3.2 Оптимизация хранения матриц для работы с кэшем процессора

Так как матрица A симметричная, то логично хранить не всю матрицу, а только верхнюю ее часть над главной диагональю и саму диагональ. Матрицу можно расположить в памяти так, что все блоки на диагонали будут иметь треугольный вид, а все остальные блоки будут либо квадратными размером $m \times m$ или $l \times l$, либо прямоугольными размером $m \times l$. Здесь l — размер последнего блока, равный $n - (n/m) * m$, здесь $/$ обозначает деление нацело. Каждый блок линейно располагается в памяти. Таким образом все вычисления можно производить прямо на месте блока A_{ij} без копирования элементов блока.

4 Описание параллельного блочного метода Холецкого

Считаем, что p — количество потоков и потоки никак не мешают друг другу. В описанном выше линейном алгоритме мы находили блоки построчно. В i -ой строке сначала получаем блок на диагонали, затем находим обратную к нему обратную матрицу. Все следующие на этой строке блоки получаются из уже вычисленных блоков, находящихся только в предыдущих строках, и полученной обратной. Таким образом, все блоки вне диагонали можно искать в любом порядке в контексте текущей строки.

Предлагается следующий параллельный алгоритм, в котором каждый поток считает блоки только из своего столбца. Принадлежность столбца потоку определяется так: i -ый поток обрабатывает столбцы с номерами $i + m * p$, где $m \in \mathbb{Z}$

Для каждой строки i из $\{1, \dots, N\}$:

 Сохранение копии $\text{Temp} = A_{\{ii\}}$

 Синхронизация потоков

 Вычисление $R_{\{ii\}}$

 Вычисление $R_{\{ii\}}^{-1}$

 Если $i = \text{tid} \pmod{p}$:

 Запись $R_{\{ii\}}$ на место $A_{\{ii\}}$

 Для каждого столбца j из $\{i+1, \dots, N\}$:

 Если $j = \text{tid} \pmod{p}$:

 Вычисление $R_{\{ij\}}$

 Запись $R_{\{ij\}}$ на место $A_{\{ij\}}$

4.1 Описание параллельного решения системы $R^T y = b$

Представляем, что R^T на самом деле не транспонированная и лежит в память как R . Но работаем с ней как с транспонированной. Тогда получаем следующий алгоритм:

Для каждого i из $\{1, \dots, N\}$:

$\text{Sum} = 0$

 Для каждой строки k из $\{1, \dots, i - 1\}$:

$\text{Sum} += R_{\{ki\}} * y[k]$

$y[i] = (b[i] - \text{Sum}) / R_{\{ii\}}$

Сделаем его параллельным. Пусть имеется p потоков. Каждый поток подсчитывает свой $y[i]$. Правило такое: если $i \% p == \text{tid}$, то поток с номером tid вычисляет $y[i]$. Также

void

compute_y_thread (mat a, vec y, vec b, int n, int m,
 int tid, int p,
 pthread_cond_t *cond,

```

        pthread_mutex_t *mut,
        int *elems_done)
{
    for (int i = 0 + tid; i < n; i += p)
    {
        double sum = 0;
        int k;
        for (k = 0; k <= i - p; k++)
        {
            sum += a[n * k + i] * y[k];
        }
        pthread_mutex_lock (mut);
        while (*elems_done < i)
        {
            pthread_cond_wait (cond, mut);
        }
        pthread_mutex_unlock (mut);
        for (; k < i; k++)
        {
            sum += a[n * k + i] * y[k];
        }
        y[i] = (b[i] - total_sum) / a[i * n + i];
        pthread_mutex_lock (mut);
        (*elems_done)++;
        pthread_cond_broadcast (cond);
        pthread_mutex_unlock (mut);
    }
}

```

Используется n точек синхронизации.

Итак, был получен параллельный алгоритм. Причем каждый поток использует только свою память, а синхронизация осуществляется за счет использования условной переменной, где условие это количество уже полученных элементов $y[i]$.

Сложность обычного алгоритма составляет

$$\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^i 2 = n * (n + 1) = n^2 + n$$

А многопоточного, в силу того, что никакой достаточно большой участок кода не выполняется с заблокированным мьютексом

$$(n^2 + n)/p$$

Теперь получим алгоритм поиска вектора x .

```

void
compute_x_thread (mat a, vec x, vec y, vec d, int n, int m,
                  int tid, int p,
                  int *sh_thread_sum)
{
    for (int i = n - 1; i >= 0; i--)

```

```

{
    sh_thread_sum[tid] = 0;
    double sum = 0;
    for (int k = i + 1 + tid; k < n; k += p)
    {
        sh_thread_sum[tid] += a[n * k + i] * x[k];
    }
    synchronize (p);
    if (tid == i % p)
    {
        for (int j = 0; j < p; j++)
        {
            sum += sh_thread_sum[j];
        }
        x[i] = d[i] * (y[i] - d[i] * sum) / a[n * i + i];
    }
    synchronize (p);
}
}

```

Используется $2n$ точек синхронизации.

Здесь все потоки используют только свою память. Сложность обычного алгоритма составляет

$$\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^i 2 = n * (n + 1) = n^2 + n$$

А многопоточного, в силу того, что никакой достаточно большой участок кода не выполняется с заблокированным мьютексом

$$(n^2 + n)/p$$

4.2 Оценка сложности в алгоритме построения верхнетреугольной матрицы в параллельном блочном разложении Холецкого

Из приведенного выше алгоритма видно, что все потоки вычисляют совпадающие диагональные блоки и обратные к ним, поэтому $S_0(n, m, p) = S_0(n, m)$ и $S_3(n, m, p) = S_3(n, m)$. Вычисление внедиагональных блоков происходит полностью параллельно: $S_1(n, m, p) = S_1(n, m)/p$. Итак,

$$S(n, m, p) = S_0(n, m) + S_3(n, m) + S_1(n, m)/p = n^3/3p - m^2n^2/6p - mn^2/3p + mn^2 - n^2/2p - n^2/2 + m^3n/6p - m^2n/3 + mn/2p + mn/2 - m^3/3$$

Причем

$$S(n, m, 1) = n^3/3 - m^2n^2/6 + 2/3mn^2 - n^2 + m^3n/6 - m^2n/3 + mn - m^3/3 = S(n, m)$$

5 Описание параллельного блочного метода Холецкого с использованием MPI

Отличие MPI версии от версии, которая использует потоки заключено в том, что из одного процесса невозможно иметь доступ ко всей матрице. Для этого будем использовать функции, которые предоставляет стандарт MPI.

5.1 Хранение матрицы в памяти

Для простоты n делится на m . Матрица представляется в виде $N = n/m$ блок-столбцов с треугольником, на гипотенузе которого расположены элементы диагонали исходной матрицы. Процесс с рангом rank считает "своими" и выделяет для них память блок-столбцы для которых выполнено $\text{rank} = I \% \text{comm_size}$, где $I \in \{0, \dots, N - 1\}$

5.2 Описание алгоритма

Алгоритм разложения

```
Для каждой строки I из {0,..., N-1}:
  Если I % commSize == rank:
  {
    memcpy (col, columns[I],
            (m * m * I + m * (m + 1) / 2) * sizeof (double))
  }
  MPI_Bcast (col, m * m * I + m * (m + 1) / 2, MPI_DOUBLE,
            I % commSize, MPI_COMM_WORLD)
  Triangle := col + m * m * I;
  R[I, I], D[I] := choletsky_decompose(Triangle)
  R[I, I]^(-1) := inverse(R[I, I])
  Если I % commSize == rank:
    A[I, I] = R[I, I]
  Для каждого столбца J из {i+1,..., N-1}:
    Если J % comm_size == rank:
      Для каждого блока K из {0,..., I-1}:
        A[I, J] -= col[K]^T * D[K] * R[K, J]
      A[I, J] = (R[I, I]^(-1))^T * D[I] * A[I, J]
```

Нахождение y

```
for (int I = 0; I < columns_n; I++)
{
  if (I % commSize == rank)
  {
    for (size_t j = 0; j < col_width; j++)
    {
      double *a = columns[I];
      double sum = 0;
      for (size_t i = 0; i < I * m; i++)
      {
        sum += a[col_width * i + j] * y[i];
      }
      a += I * m * col_width;
      for (size_t i = I * m; i < I * m + j; i++)
      {
        sum += a[get_elU (i - I * m, j, col_width)] * y[i];
      }
      y[I * m + j] =
        (b[I * m + j] - sum) / a[get_elU (j, j, col_width)];
    }
  }
}
```

```

    }
    MPI_Bcast (y + I * m, col_width, MPI_DOUBLE, I % commSize,
               MPI_COMM_WORLD);
}

```

Нахождение x

```

for (size_t i = n - 1; i < n; i--)
{
    buf = gather_row (rows_p, i);
    if (rank == root)
    {
        double sum = 0;
        for (size_t j = i + 1; j < n; j++)
        {
            sum += buf[j] * x[j];
        }
        x[i] = d[i] * (y[i] - d[i] * sum) / buf[i];
    }
}

```

5.3 Объем пересылаемых данных

В разложении нужно N раз переслать данные общим размером равным размеру всей матрицы, то есть $n * (n + 1)/2$. При нахождении вектора y нужно N раз переслать данные общим размером n . При нахождении вектора x нужно $N * n$ раз переслать данные общим размером $n * (n + 1)/2$.

В итоге количество пересылок равно $2N + N * n$, а общий объем пересылаемых данных $n^2 + \frac{3}{2}n$.

5.4 Оценка количества операций

По сравнению с поточной версией количество операций не изменилось.