Risoluzione di Sistemi Lineari di Grandi Dimensioni Utilizzando Calcolo Parallelo su Cluster HPC Implementazione e Confronto tra MPI, OpenMP e CUDA

Giuseppe Dimonte MAT 367431



Università degli Studi di Parma

Abstract

• Progetto:

- Implementazione ed esecuzione di algoritmi paralleli per la risoluzione di sistemi lineari di grandi dimensioni
- Utilizzo del metodo di Gauss-Seidel su un cluster HPC
- Tecnologie esplorate: MPI, OpenMP e CUDA

Introduzione

Il metodo di Gauss-Seidel è un algoritmo utilizzato per risolvere sistemi di equazioni lineari.

- Metodo iterativo
- Particolarmente utile per sistemi non simmetrici o di grandi dimensioni

Idea di Base

Utilizza soluzioni approssimate durante l'iterazione stessa.

- Inizia con una soluzione iniziale
- Continua a migliorare fino a raggiungere la precisione desiderata

Procedura - Inizializzazione

- Scegli un'approssimazione iniziale $x^{(0)}$
- Imposta un criterio di arresto (es. numero massimo di iterazioni o tolleranza sull'errore)

Per ogni equazione i del sistema, aggiorna il valore di x_i :

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right)$$



Procedura - Convergenza

Continua ad iterare finché la soluzione non soddisfa il criterio di arresto:

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| < \epsilon$$

dove ϵ è la tolleranza prefissata.

Il metodo converge se la matrice A è:

- A dominanza diagonale stretta
- Simmetrica e definita positiva

Esempio

Supponiamo di voler risolvere il sistema:

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 = 5 \\ x_1 + 2x_2 = 5 \end{cases}$$

• Inizializzazione: $x^{(0)} = [0, 0]$

Iterazione 1:

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{3}(5-0) = \frac{5}{3}$$
 $x_2^{(1)} = \frac{1}{2}(5-\frac{5}{3}) = \frac{10}{6} \approx 1.67$

Iterazione 2:

$$x_1^{(2)} = \frac{1}{3}(5 - 1.67) \approx 1.11$$

 $x_2^{(2)} = \frac{1}{2}(5 - 1.11) \approx 1.94$

Vantaggi e Svantaggi del Metodo Gauss-Seidel

Vantaggi del Metodo

- Può convergere più rapidamente rispetto al metodo di Jacobi
- Semplice da implementare
- Richiede meno memoria rispetto ai metodi diretti

Svantaggi del Metodo

- Non garantisce la convergenza per tutti i sistemi
- Può richiedere un numero elevato di iterazioni
- La convergenza può dipendere dalla scelta della soluzione iniziale

Applicazioni

Utilizzato in ingegneria, fisica e matematica applicata per:

• Risoluzione di grandi sistemi di equazioni sparse

Implementazione con CUDA

- Sfrutta la potenza di elaborazione delle GPU.Implementa algoritmi come il metodo di Gauss-Seidel sfruttando la potenza delle GPU.
- Iterazioni parallele sui thread della GPU
- Utilizzo di CUDA per eseguire calcoli paralleli e accelerare la convergenza
- CUDA (Compute Unified Device Architecture) è una piattaforma di calcolo parallelo di NVIDIA.
- Le GPU eseguono operazioni in parallelo su molti thread, accelerando notevolmente il calcolo.

Implementazione con MPI

- Standard per la comunicazione parallela su sistemi distribuiti
- Utilizzato per la distribuzione del lavoro tra nodi del cluster
- Comunicazione tra processi per sincronizzare le iterazioni del metodo di Gauss-Seidel
- MPI (Message Passing Interface) facilità la comunicazione tra processi su cluster.
- Essenziale per distribuire il lavoro in modo efficiente tra i nodi di un cluster.
- Sincronizza iterazioni durante il calcolo parallelo del metodo di Gauss-Seidel.

Implementazione con OpenMP

- API per la programmazione parallela su sistemi con memoria condivisa
- Utilizzato per la parallelizzazione su CPU
- Direttive di compilazione per gestire il threading parallelo e ottimizzare le prestazioni
- OpenMP (Open Multi-Processing) semplifica la programmazione parallela su multi-core.
- Ottimizzato per sfruttare le capacità multi-core delle moderne CPU.
- Le direttive di compilazione di OpenMP gestiscono threading parallelo per prestazioni ottimali.

Algoritmo Sequenziale

Un algoritmo sequenziale è un insieme di istruzioni che vengono eseguite una dopo l'altra in un singolo flusso di controllo. Ogni passo dell'algoritmo viene completato prima di passare al successivo, e non c'è parallellismo implicito. Questo significa che il programma non divide il lavoro tra più processori o thread, ma esegue tutte le operazioni su un singolo processore.

Caratteristiche degli Algoritmi Sequenziali

- Linearità: Le operazioni sono eseguite in una sequenza lineare, una dopo l'altra.
- **Single-threaded**: Eseguito su un singolo thread o processore.
- **Determinismo**: Il risultato di un algoritmo sequenziale è deterministico, dato un input fisso, produce sempre lo stesso output.
- **Risorse Limitate**: Utilizza le risorse di un singolo processore, il che può limitare le prestazioni in caso di calcoli intensivi.

Generazione del Dataset

- La matrice A è generata casualmente e modificata per essere diagonale dominante.
- Il vettore dei termini noti b è creato con valori casuali per rappresentare le soluzioni.
- I dati sono salvati in file di testo per l'input degli algoritmi di risoluzione del sistema.

Configurazione ed Esecuzione su HPC

Per eseguire programmi parallelizzati OpenMP, MPI e CUDA su un cluster HPC, è necessario configurare un file SLURM. Questo file specifica i dettagli del job:

- Nome del job
- Tempo massimo di esecuzione
- Quanti processi e quanti core nel caso di MPI
- Quanti thread e quanti core nel caso di OpenMP
- Quanti kernel thread nel caso di CUDA e quale GPU è stata usata
- Generazione del report

Inoltre, carica i moduli necessari per la compilazione ed esecuzione dei programmi.

Gestione del Job

Il file SLURM ci genera dei report, dai quali ricavo:

- Misurazione del tempo di esecuzione
- Tempo di esecuzione dell'algoritmo sequenziale
- Calcolo della media dei tempi
- Deviazione standard
- Generazione del report
- Speedup

Implementazione della Simulazione

- Implementa l'algoritmo sequenziale e gli algoritmi (MPI, CUDA, OpenMP) per Gauss-Seidel.
- Misura il tempo di esecuzione dell'algoritmo sequenziale per un numero fisso di iterazioni.
- Misura il tempo di esecuzione degli algoritmi per Gauss-Seidel per lo stesso numero di iterazioni.

Calcolo del Tempo Medio

 Calcola il tempo medio di esecuzione per gli algoritmi (sequenziale e paralleli) basato sui 10 risultati ottenuti.

Tempo medio di esecuzione =
$$\frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} T_i$$

dove T_i sono i tempi di esecuzione registrati.

Calcolo della Deviazione Standard

 Calcola la deviazione standard del tempo di esecuzione per entrambi gli algoritmi.

Deviazione standard =
$$\sqrt{\frac{1}{10}\sum_{i=1}^{10}(T_i-\text{Tempo medio})^2}$$

Calcolo dello Speedup

• Lo speedup è il rapporto tra il tempo di esecuzione dell'algoritmo sequenziale e quello degli algoritmi paralleli.

$$Speedup = \frac{Tempo \ di \ esecuzione \ sequenziale}{Tempo \ di \ esecuzione \ Algoritmi}$$

Confronto delle Prestazioni

Il confronto delle prestazioni dei diversi metodi di Gauss-Seidel è riassunto nella Tabella 1. Ogni metodo è stato eseguito su un dataset di dimensione N=1000.

Metodo	Media (s)	Deviazione Std. (s)	Speedup
Gauss-Seidel CUDA	1.780	0.050	2.801
Gauss-Seidel MPI	1.165	0.223	4.27
Gauss-Seidel OpenMP	0.655	0.462	7.56

Tabella: Confronto delle prestazioni dei metodi Gauss-Seidel con dataset di dimensione 1000.

Gauss-Seidel CUDA

Imp	GPU Utilizzata	N Thread Blocco	N di Blocchi
CUDA	Tesla P100-PCIE-12GB	256	4

Tabella: Dettagli delle implementazioni per CUDA

Utilizzando la GPU

Tempo medio: 1.780 secondi

• Deviazione standard: 0.050 secondi

• Speedup: circa 2.801 rispetto al metodo sequenziale

Gauss-Seidel MPI

Implementazione	N di Processi MPI	N di Core per Processo
MPI	4	1

Tabella: Dettagli delle implementazioni per MPI

- Utilizzando 4 processi MPI, ognuno con 1 core
- Tempo medio: 1.165 secondi
- Deviazione standard: 0.223 secondi
- Speedup: circa 4.27 rispetto al metodo sequenziale

Gauss-Seidel OpenMP

Implementazione	N di Thread OpenMP	N di Core Utilizzati
OpenMP	4	4

Tabella: Dettagli delle implementazioni per OpenMP

- Utilizzando 4 thread OpenMP su 4 core
- Tempo medio: 0.655 secondi
- Deviazione standard: 0.462 secondi
- Speedup: circa 7.56 rispetto al metodo sequenziale

Conclusioni

Questi passaggi permettono una valutazione dettagliata delle prestazioni degli algoritmi di Gauss-Seidel implementati in CUDA, MPI, OpenMP rispetto alla loro controparte sequenziale.

- Tecnologie diverse offrono approcci diversi per parallelizzare il metodo di Gauss-Seidel
- Scelta della tecnologia dipende dalle esigenze dell'applicazione e dall'hardware disponibile
- MPI, OpenMP e CUDA hanno vantaggi specifici a seconda del contesto