

银河机向量线性代数库的 并行算法研究及优化

何新芳 胡庆丰 李 忠

(电子计算机系)

摘要 文中对YH-1标量线性代数库进行并行算法研究：改造串行算法，挖掘其中的向量成份，实行并行计算。根据并行机的特点采取有效的程序优化措施，设计出银河机向量线性代数库。该库采用各种直接解法的并行算法求解各类线性代数问题，精度好，运行速度快（当n=300时，向量库运行速度平均为标量库的13倍）。

关键词 线性代数， 并行算法， 向量程序

分类号 TP31

在现代科学与工程的计算中，线性代数问题的计算是很频繁、很广泛的一类计算。但是目前国内外装机使用的线性代数库，大都采用传统的串行算法，计算效率不高。

随着并行机的研制和发展，并行算法的研究和应用也越来越引起人们的关注。研制并行计算应用软件包，对串行计算软件包进行并行算法改造，以充分发挥并行计算机的特性，以及提高计算效率，成为并行算法研究的重要课题。

本文介绍作者在并行算法研究的基础上，如何对YH-1标量线性代数库进行算法改造和程序优化，研制开发出银河机向量线性代数库。

1 基本内容

银河机向量线性代数库采用各种直接解法，如Lu分解法、Cholesky分解法、块对角元素法、追赶法、Householder变换法、QR分解法等的并行计算，求解各类线性代数问题即对实型、复型、双精度型的一般矩阵、对称矩阵、对称正定矩阵、一般带状矩阵、对称正定带状矩阵、三对角矩阵、对称正定三对角矩阵、长方形矩阵及各种Hermite矩阵等进行矩阵分解，估计矩阵性态数，解相应的线性代数方程组、求矩阵的逆阵和行列式值等。

2 并行算法的研究和实现

要把传统的串行计算线性代数库改造成并行计算的向量库，首先要研究其并行算

法。作者对原标量库的串行程序进行了静态分析和动态测试，找出影响运算速度的核心部分，研究其并行算法及有效的实现措施，主要有以下几个方面：

(1) 矩阵分解、解相应的线性代数方程组以及估计矩阵性态数的并行计算。

方程组的容易求解形式是三角形方程组，矩阵或向量运算能够有效的利用并行机。因此，作者研究了各种矩阵三角形分解法的并行算法。如矩阵的 Lu 分解法可通过如下的矩阵运算实行并行计算：

$$PA = Lu \quad (1)$$

式中， A 是 $n \times n$ 阶非奇异矩阵， P 是交换矩阵， L 是单位下三角阵， u 是上三角阵。要得到分解(1)，可通过 $n-1$ 步完成，假定第 k 步已经进行行交换，使得

$$a_{k,k}^{(k)} = \max_{K < i < n} |a_{i,k}^{(k)}| \neq 0$$

并定义

$$\begin{bmatrix} l_{k+1,k} \\ l_{k+2,k} \\ \vdots \\ l_{n,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{k+1,k}^{(k)} \\ a_{k+2,k}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{n,k}^{(k)} \end{bmatrix} / a_{k,k}^{(k)} \quad (2)$$

用初等下三角阵

$$L^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ \ddots & 1 & & & \\ & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ 0 & \vdots & 0 & \ddots & \\ & -l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

左乘矩阵 $A^{(k)}$ 得

$$A^{(k+1)} = L^{(k)} A^{(k)} \quad (4)$$

经过 $k=1, 2, \dots, n-1$ 步就得到：

$$u = A^{(n)} = L^{(n-1)} L^{(n-2)} \dots L^{(1)} A^{(1)} \quad (5)$$

容易证明 $L^{(k)}$ 的逆由下式得出：

$$(L^{(k)})^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ \ddots & 1 & & & \\ & l_{k+1,k} & 1 & & \\ 0 & \vdots & 0 & \ddots & \\ & l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

用 $(L^{(n-1)})^{-1}, \dots, (L^{(1)})^{-1}$ ，连续左乘方程(5)得：

$$A = (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \dots (L^{(n-1)})^{-1} u \quad (7)$$

而(6)式的连续直接乘得到：

$$(L^{(1)})^{-1}(L^{(2)})^{-1}\dots(L^{(n-1)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} = L \quad (8)$$

从而得到矩阵分解(1), 其 u 为式(5), L 是式(8)。

在系数矩阵分解之后, 求解方程组

$$AX=B \quad (9)$$

就等价于求解三角形方程组:

$$LY=B, uX=Y \quad (10)$$

对于(10)式, 使用列扫描法的并行计算^[3]容易求解。

关于块对角主元素法及对称矩阵性态数估计的并行算法见文献[1]和[2], 其他矩阵分解的并行算法这里不再赘述。

(2) 公共子程序集中基本代数问题计算的并行算法研究及实现。

原标量库中, 用户经常使用的子程序要多次调用公共子程序集中基本代数问题计算的专用功能模块, 每个功能模块完成一个基本功能。这些模块大致分两类:

一类如向量交换, 向量数乘等可以直接进行算法改造, 实行并行计算, 写成向量语句插入调用该功能模块的原程序段中。这类功能模块共有16个。例如模块 CAXPY, 它的功能是将一个向量加上另一个向量的数乘, 可直接进行并行计算:

$$\begin{bmatrix} CY(1) \\ CY(1+INCY) \\ \vdots \\ CY[1+(N-1)\times INCY] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} CY(1) \\ CY(1+INCY) \\ \vdots \\ CY[1+(N-1)\times INCY] \end{bmatrix} + CA * \begin{bmatrix} CX(1) \\ CX(1+INCX) \\ \vdots \\ CX[1+(N-1)\times INCX] \end{bmatrix} \quad (11)$$

当 $INCX=1$, $INCY=1$ 时, 可直接写成向量语句:

$$CY(1:N)=CY(1:N)+CA*CX(1:N)$$

插入调用该功能模块的程序段中。

第二类基本代数问题专用功能模块, 其计算的相关性很强, 用向量FORTRAN语言描述难以达到高效。如找数组的最大元素下标, 求点积, 求和, 求范数等。对这类模块, 要研究其并行算法, 结合并行机的特点, 充分利用向量功能部件、链接技术和循环特性等, 设计高效率的汇编程序。此类功能模块共有16个。例如模块 IDAMAX, 它的功能是找双精度数组中绝对值最大的元素下标。为提高效率, 采用如下并行算法, 并设计成高效汇编程序: 首先使用分段法把数组中 N 个元素分为 $\left[\frac{N}{128}\right]+1$ 段, 经过 $\left[\frac{N}{128}\right]$ 步, 找

出128个绝对值最大的元素及其下标。然后对这128个元素采用二分法，再经过 $\log_2(128)=7$ 步，即得到要求的绝对值最大的元素及其下标。此外，在找双精度数组中绝对值最大的元素时，需要进行双精度减法运算，为提高效率，应尽量避免调用双精度四则运算的子程序。在研制汇编子程序时，采用了双精度数组元素首先比高位，高位绝对值大者必为大数；若高位相同，再比低位。这避免了转子，双精度减法及求绝对值运算。大大提高了运算速度，当 $N=200$ 时，该功能模块速度提高34倍。

3 程序优化

作者采取了以下几方面的程序优化措施：

- (1) 凡是能用向量语句描述的循环语句和表达式，一律用向量语句描写，如简单循环、数组赋值、数组交换等。
- (2) 实行循环体分割，尽量挖掘向量成份，提高运行速度。
- (3) 引入临时工作数组，化串行计算为并行计算。
- (4) 根据YH-1机的特点，尽快减少除法运算。

4 效能分析

银河机向量线性代数库算法先进，计算结果正确可靠，与精确解相比较，单精度（实、复型）误差在 10^{-8} 以内，双精度误差在 10^{-20} 以内。尤其是效率高，运行速度快。当 $n=300$ 时，向量库运行速度平均为标量库的13倍（见表1）。同时还具有程序简炼、易读、易维护、通用性好，实用性强，使用方便等特点。

表中：阶数 $n=300$ ； t_s ， t_v 分别为标量库与向量库运行总时间，单位秒；加速比 $S_p=t_s/t_v$ 。

5 结束语

银河机向量线性代数库的研制成功表明：并行算法的研究和程序优化对提高并行机的效率，对科研、生产有着重要的意义。随着并行机的发展和广泛使用，在并行算法理论研究的同时，结合并行机的特点，研制出一批相应的高效并行计算应用软件包是并行算法研究的重要课题。

表1 向量库与标量库运行时间比较

| | 实型 | 复型 | 双精度型 |
|-------|---------|---------|---------|
| t_s | 1358.47 | 1985.86 | 5718.67 |
| t_v | 70.51 | 132.84 | 937.03 |
| S_p | 19 | 15 | 6.0 |

参 考 文 献

- [1] 李晓梅，何新芳。块对角主元法的并行计算。国防科大学报，1986，(1)：101~111
- [2] 李晓梅，何新芳。对称矩阵性质的并行计算。国防科大学报，1989，(1)：101~107
- [3] 王嘉漠，沈毅。并行计算方法。北京：国防工业出版社
- [4] Duff I S, Erisman A M and Reid J K. Direct Methods for Sparse Matrices
Clarendon Press Oxford, 1986, 41~63

Parallel Algorithm Research and Optimization of the YH Vectorized Linear Algebra Package

He Xinfang Hu Qingfeng Li Zhong

(Department of Computer)

Abstract

This paper introduces the YH Vectorized Linear Algebra program package, which is designed and developed meticulously on the basis of the scalar one, by practising parallel algorithm research, taking parallel computation and adopting program optimization technique as well. With parallel computation of various direct methods solving various linear algebra problems, it has rapid operation speed and it's an efficient, high precision package.

Key words: linear algebra; parallel algorithm, vectorized program

欢迎订阅《模糊系统与数学》杂志

《模糊系统与数学》系中国模糊数学与模糊系统学会会刊，由国防科技大学承办。主要刊登模糊集的数学理论，模糊系统的基本理论，模糊数学在科学的研究和人工智能的应用等。

本刊为半年刊，每期96页，自办发行，定价2.20元，另收邮费0.30元，收款后即寄收据。由银行汇款请写国防科技大学七系财务办，开户银行：湖南省长沙市丝茅冲分理处，帐号：110008525004 邮局汇款寄：长沙市国防科技大学七系《模糊系统与数学》编辑部，邮政编码410073。