Software Q-system for the Research of the Resource of Numerical Algorithms Parallelism[1]

Valentina Aleeva, Ekaterina Bogatyreva, Artem Sleznev, Mikhail Sokolov, Artemii Shuppa

South Ural State University (National Research University)

Russian Supercomputing Days
Moscow, 2019

[1]The reported study was funded by RFBR according to the research project № 17-07-00865 a. The work was supported by Act 211 Government of the Russian Federation, contract № 02.A03.21.0011.

Актуальность исследования

- Алгоритмы не применяют вычислительные ресурсы параллельных вычислительных систем (ПВС) настолько, насколько они способны это делать.
- Эффективность эксплуатации ПВС можно повысить, если использовать весь внутренний ресурс параллелизма алгоритмов.
- Следовательно, проблема исследования внутреннего ресурса параллелизма алгоритмов и его использования для повышения эффективности параллельных вычислений является актуальной, а ее решение имеет научное и практическое значение.

Цель и задачи исследования

Цель исследования —
решение описанной проблемы в случае численных алгоритмов.

Для достижения цели решены следующие задачи.

1. Разработана программная система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов
(решение описано в работе, поданной на данную конференцию).
2. Разработана технология программирования для проектирования программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью
(докладывалась на конференции прошлого года).
3. Разработана технология программирования для повышения эффективности реализации алгоритмических проблем
(основана на решении первых двух задач).

Теоретический фундамент для исследования

- Теоретическим фундаментом для исследования является концепция Q-детерминанта.
- Концепция Q-детерминанта — один подходов к распараллеливанию численных алгоритмов.
- Концепция основана на универсальном описании численных алгоритмов — представлении в форме Q-детерминанта.

Алгоритмическая проблема

Алгоритмическая проблема может быть представлена в виде

$$\bar{y} = F(N, B),$$

где $N = \{n_1, \ldots, n_k\}$ — множество параметров размерности проблемы или пустое множество,
B — множество входных данных,
$\bar{y} = (y_1, \ldots, y_m)$ — множество выходных данных, m является вычислимой функцией параметров N.
Далее через $\bar{N}$ будем обозначать вектор $(\bar{n}_1, \ldots, \bar{n}_k)$, где $\bar{n}_i$ — некоторое заданное значение параметра n_i $(1 \leqslant i \leqslant k)$.

Кратко о понятии Q-детерминанта алгоритма

- Пусть $\mathcal{A}$ — численный алгоритм для решения алгоритмической проблемы,
  Q — множество операций, используемых алгоритмом $\mathcal{A}$,
  B — множество входных и $\bar{y} = (y_1, \ldots, y_m)$ — множество выходных данных алгоритма $\mathcal{A}$.
- Для каждого y_i $(i = 1, \ldots, m)$ строится Q-терм, который описывает все способы вычисления y_i в зависимости от B в соответствии с алгоритмом $\mathcal{A}$.
- Алгоритм $\mathcal{A}$ определяет свой Q-детерминант, как набор Q-термов.
- С помощью Q-детерминанта фактически выполняется логический анализ алгоритма $\mathcal{A}$, позволяющий строить все возможные вычисления y_i $(i = 1, \ldots, m)$ по B согласно алгоритму.

Примеры педставления алгоритмов в форме Q-детерминантов

- Алгоритм умножения плотных матриц сразу представлен в форме Q-детерминанта $c_{ij} = \sum_{s=1}^{k} a_{is} b_{sj}$ $(i = 1, \ldots, n; j = 1, \ldots, m)$ из nm безусловных Q-термов.
- Однако численные алгоритмы чаще не представлены в форме Q-детерминанта, но их представление можно найти.

1) Представление в форме Q-детерминанта алгоритма, реализующего метод Гаусса—Жордана решения СЛАУ (n — размер матрицы):

$$x_j = \{(u_1, w_1^j), \ldots, (u_{n!}, w_{n!}^j)\}(j = 1, \ldots, n).$$

Q-детерминант состоит из n условных Q-термов длины $n!$.

2) Представление в форме Q-детерминанта алгоритма, реализующего метод Якоби решения СЛАУ (n — размер матрицы, ε — точность вычислений):

$$x_i = \{(||\bar{x}^1 - \bar{x}^0|| < \varepsilon, x_i^1), \ldots, (||\bar{x}^k - \bar{x}^{k-1}|| < \varepsilon, x_i^k), \ldots\}(i = 1, \ldots, n).$$

Q-детерминант состоит из n условных бесконечных Q-термов.

Q-эффективная реализация алгоритма

- *Реализацией алгоритма* $\mathcal{A}$, представленного в форме Q-детерминанта, называется вычисление Q-термов.
- Если реализация такова, что Q-термы вычисляются одновременно (параллельно) и при вычислении каждого из них операции выполняются по мере их готовности, то реализация называется *Q-эффективной*.
- Если алгоритм допускает распараллеливание, то его Q-эффективная реализация полностью использует ресурс параллелизма алгоритма.
- Реализация алгоритма называется *выполнимой*, если одновременно необходимо выполнять конечное число операций.

Характеристики параллельной сложности Q-эффективной реализации алгоритма

Пусть $W(\bar{N})$ — выражения, из которых состоят Q-термы Q-детерминанта алгоритма $\mathcal{A}$,
$T^{w(\bar{N})}$ — уровень вложенности выражения $w(\bar{N})$.
Введем характеристики:

1) $D_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ — максимальное число уровней вложенности выражений $W(\bar{N})$, т.е. $D_{\mathcal{A}}(\bar{N}) = \max\limits_{w(\bar{N})\in W(\bar{N})} T^{w(\bar{N})}$;
2) $P_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ — максимальное из значений, представляющих количество операций на каждом из уровней вложенности всех выражений $W(\bar{N})$, т.е. $P_{\mathcal{A}}(\bar{N}) = \max\limits_{1\leqslant r\leqslant D_{\mathcal{A}}(\bar{N})} \sum_{w(\bar{N})\in W(\bar{N})} O_r^{w(\bar{N})}$, где $O_r^{w(\bar{N})}$ — количество операций уровня вложенности r выражения $w(\bar{N})$.

$D_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ будем называть высотой алгоритма, $P_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ — его шириной.
$D_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ характеризует время выполнения Q-эффективной реализации алгоритма,

$P_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ — количество процессоров, необходимое для ее выполнения.

ЗАДАЧА 1. Программная Q-система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов

Для автоматизированного исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов были предложены следующие методы.

1) Метод построения Q-детерминанта алгоритма на основе его блок-схемы.
2) Метод получения Q-эффективной реализации алгоритма с помощью Q-детерминанта.
3) Метод вычисления характеристик параллельной сложности Q-эффективной реализации алгоритма.
4) Метод сравнения характеристик параллельной сложности Q-эффективных реализаций двух алгоритмов.

ЗАДАЧА 1. Программная Q-система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов

- В настоящее время разработана программная система, реализующая данные методы.
- Она получила название «Q-система (Q-system)».
- В режиме просмотра информации Q-система доступна всем по адресу

`https://qclient.herokuapp.com`

ЗАДАЧА 1. Программная Q-система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов

Q-система позволяет:

1) оценить характеристики параллельной сложности любого численного алгоритма $\mathcal{A}$ —

$$\text{высоту } D_{\mathcal{A}}(\bar{N}) \text{ и ширину } P_{\mathcal{A}}(\bar{N});$$

2) из множества численных алгоритмов, решающих одну и ту же алгоритмическую проблему, выбрать алгоритм с лучшим ресурсом внутреннего параллелизма.

ЗАДАЧА 1. Программная Q-система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов

Q-система состоит из двух подсистем:

1. для формирования Q-детерминантов алгоритмов;
2. для вычисления ресурса параллелизма алгоритмов.

ЗАДАЧА 1. Программная Q-система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов

- Первая подсистема по блок-схеме алгоритма формирует представления в форме Q-детерминанта для фиксированных значений параметров размерности $\bar{N}$ и количества итераций алгоритма.
- Подсистема является консольным приложением. Разработана с помощью языка программирования *C#* на базе платформы *.NET* в соответствии с парадигмой объектно-ориентированного программирования. В качестве среды разработки использовалась *Microsoft Visual Studio*.
- Для описания входных и выходных данных применяется язык *JSON*.

```
{"Vertices":[
        {"Id":1,"Type":0,"Content":"Start"},
        {"Id":2,"Type":4,"Content":"A[n,n]"},
        {"Id":3,"Type":4,"Content":"B[n]"},
        {"Id":4,"Type":4,"Content":"X0[n]"},
        {"Id":5,"Type":4,"Content":"e"},
        {"Id":6,"Type":4,"Content":"iterations"},
        {"Id":7,"Type":2,"Content":"it=1"},
        {"Id":8,"Type":2,"Content":"i=1"},
        {"Id":9,"Type":3,"Content":"i<=n"},
        {"Id":10,"Type":2,"Content":"X(i)=X0(i)"},
        {"Id":11,"Type":2,"Content":"i=i+1"},
        {"Id":12,"Type":2,"Content":"i=1"},
        {"Id":13,"Type":3,"Content":"i<=n"},
        {"Id":14,"Type":2,"Content":"newX(i)=B(i)"},
        {"Id":15,"Type":2,"Content":"j=1"},
        {"Id":16,"Type":3,"Content":"j<=n"},
        {"Id":17,"Type":3,"Content":"i!=j"},
        {"Id":18,"Type":3,"Content":"j<i"},
        {"Id":19,"Type":2,"Content":"D=A(i,j)*newX(j)"},
        {"Id":20,"Type":2,"Content":"D=A(i,j)*X(j)"},
        {"Id":21,"Type":2,"Content":"newX(i)=newX(i)-D"},
        {"Id":22,"Type":2,"Content":"j=j+1"},
        {"Id":23,"Type":2,"Content":"newX(i)=newX(i)/A(i,i)"},
        {"Id":24,"Type":2,"Content":"i=i+1"},
        {"Id":25,"Type":2,"Content":"i=1"},
        {"Id":26,"Type":2,"Content":"D=X(i)-newX(i)"},
        {"Id":27,"Type":2,"Content":"norm=abs(D)"},
        {"Id":28,"Type":2,"Content":"X(i)=newX(i)"},
        {"Id":29,"Type":2,"Content":"i=i+1"},
        {"Id":30,"Type":3,"Content":"i<=n"},
        {"Id":31,"Type":2,"Content":"D=X(i)-newX(i)"},
        {"Id":32,"Type":2,"Content":"D=abs(D)"},
        {"Id":33,"Type":2,"Content":"norm=norm+D"},
        {"Id":34,"Type":3,"Content":"norm<e"},
        {"Id":35,"Type":2,"Content":"it=it+1"},
        {"Id":36,"Type":3,"Content":"it<=iterations"},
        {"Id":37,"Type":5,"Content":"X[n]"},
        {"Id":38,"Type":1,"Content":"End"}],
"Edges":[
        {"From":1,"To":2,"Type":2},     {"From":2,"To":3,"Type":2},
        {"From":3,"To":4,"Type":2},     {"From":4,"To":5,"Type":2},
        {"From":5,"To":6,"Type":2},     {"From":6,"To":7,"Type":2},
        {"From":7,"To":8,"Type":2},     {"From":8,"To":9,"Type":2},
        {"From":9,"To":10,"Type":1},    {"From":9,"To":12,"Type":0},
        {"From":10,"To":11,"Type":2},   {"From":11,"To":9,"Type":2},
        {"From":12,"To":13,"Type":2},   {"From":13,"To":14,"Type":1},
        {"From":13,"To":25,"Type":0},   {"From":14,"To":15,"Type":2},
        {"From":15,"To":16,"Type":2},   {"From":16,"To":17,"Type":1},
        {"From":16,"To":23,"Type":0},   {"From":17,"To":18,"Type":1},
        {"From":17,"To":22,"Type":0},   {"From":18,"To":19,"Type":1},
        {"From":18,"To":20,"Type":0},   {"From":19,"To":21,"Type":2},
        {"From":20,"To":21,"Type":2},   {"From":21,"To":22,"Type":2},
        {"From":22,"To":16,"Type":2},   {"From":23,"To":24,"Type":2},
        {"From":24,"To":13,"Type":2},   {"From":25,"To":26,"Type":2},
        {"From":26,"To":27,"Type":2},   {"From":27,"To":28,"Type":2},
        {"From":28,"To":29,"Type":2},   {"From":29,"To":30,"Type":2},
        {"From":30,"To":31,"Type":1},   {"From":30,"To":34,"Type":0},
        {"From":31,"To":32,"Type":2},   {"From":32,"To":33,"Type":2},
        {"From":33,"To":28,"Type":2},   {"From":34,"To":37,"Type":1},
        {"From":34,"To":35,"Type":0},   {"From":35,"To":36,"Type":1},
        {"From":36,"To":12,"Type":1},   {"From":36,"To":37,"Type":0},
        {"From":37,"To":38,"Type":2}]}
```


Рис.1. Блок-схема метода Гаусса—Зейделя в формате JSON

```
X(1)={"op":"<","fO":{"op":"+","fO":{"op":"abs","od":{"op":"-","fO":"X0(1)","sO":{"op":"/","fO":{"op":"-","fO":"B
(1)","sO":{"op":"*","fO":"A(1,2)","sO":"X0(2)"}},"sO":"A(1,1)"}}},"sO":{"op":"abs","od":{"op":"-","fO":"X0
(2)","sO":{"op":"/","fO":{"op":"-","fO":"B(2)","sO":{"op":"*","fO":"A(2,1)","sO":{"op":"/","fO":
{"op":"-","fO":"B(1)","sO":{"op":"*","fO":"A(1,2)","sO":"X0(2)"}},"sO":"A(1,1)"}}},"sO":"A(2,2)"}}}},"sO":"e"};
{"op":"/","fO":{"op":"-","fO":"B(1)","sO":{"op":"*","fO":"A(1,2)","sO":"X0(2)"}},"sO":"A(1,1)"}
X(2)={"op":"<","fO":{"op":"+","fO":{"op":"abs","od":{"op":"-","fO":"X0(1)","sO":{"op":"/","fO":{"op":"-","fO":"B
(1)","sO":{"op":"*","fO":"A(1,2)","sO":"X0(2)"}},"sO":"A(1,1)"}}},"sO":{"op":"abs","od":{"op":"-","fO":"X0
(2)","sO":{"op":"/","fO":{"op":"-","fO":"B(2)","sO":{"op":"*","fO":"A(2,1)","sO":{"op":"/","fO":
{"op":"-","fO":"B(1)","sO":{"op":"*","fO":"A(1,2)","sO":"X0(2)"}},"sO":"A(1,1)"}}},"sO":"A(2,2)"}}}},"sO":"e"};
{"op":"/","fO":{"op":"-","fO":"B(2)","sO":{"op":"*","fO":"A(2,1)","sO":{"op":"/","fO":{"op":"-","fO":"B
(1)","sO":{"op":"*","fO":"A(1,2)","sO":"X0(2)"}},"sO":"A(1,1)"}}},"sO":"A(2,2)"}
```


Рис.2. Представление метода Гаусса—Зейделя в форме Q-детерминанта в формате JSON (матрица порядка 2, одна итерация)

ЗАДАЧА 1. Программная Q-система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов

- Вторая подсистема для вычисления ресурса параллелизма численных алгоритмов включает базу данных, серверное и клиентское приложения.
- Для разработки базы данных использовалась СУБД *PostgreSQL*.
- База данных содержит сущности *Algorithms* и *Determinants*.
- Атрибуты сущности *Algorithms*: первичный ключ, название алгоритма, описание алгоритма, количество загруженных в базу данных Q-детерминантов для различных значений параметров размерности и количества итераций.
- Атрибуты сущности *Determinants*: первичный ключ, уникальный идентификатор алгоритма, значения параметров размерности, Q-детерминант, значения $D_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ и $P_{\mathcal{A}}(\bar{N})$, количество итераций.

ЗАДАЧА 1. Программная Q-система для исследования ресурса параллелизма численных алгоритмов

Серверное приложение реализует следующие методы:

- запись нового алгоритма,
- обновление информации об алгоритме,
- получение списка алгоритмов,
- загрузка нового Q-детерминанта и рассчитанных характеристик $D_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ и $P_{\mathcal{A}}(\bar{N})$,
- сравнение характеристик $D_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ или $P_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ двух алгоритмов,
- получение списка Q-детерминантов,
- скачивание Q-детерминанта,
- удаление Q-детерминанта,
- удаление алгоритма вместе с его Q-детерминантами,
- интерполяция и экстраполяция функций $D_{\mathcal{A}}(\bar{N})$ и $P_{\mathcal{A}}(\bar{N})$.

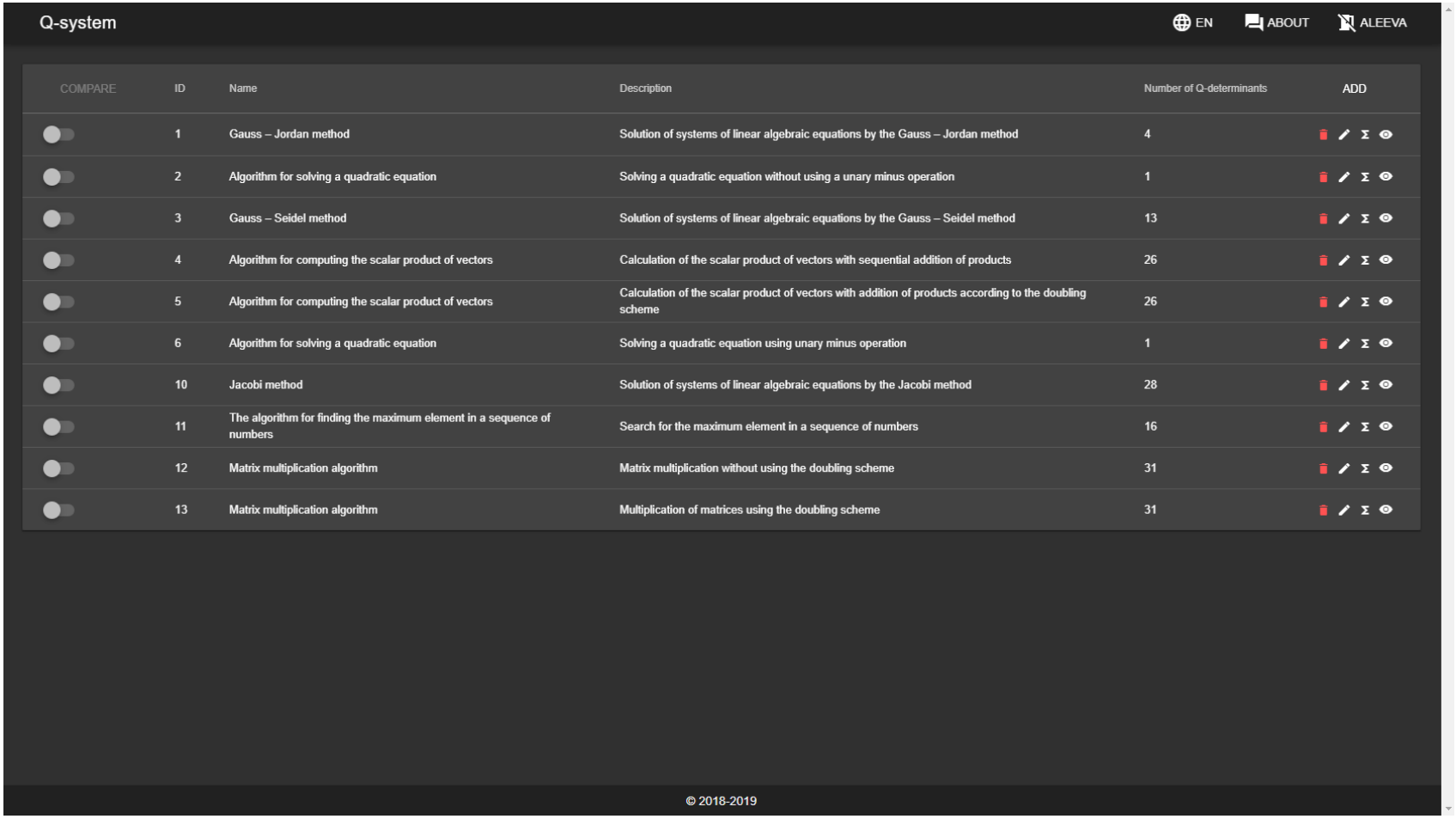
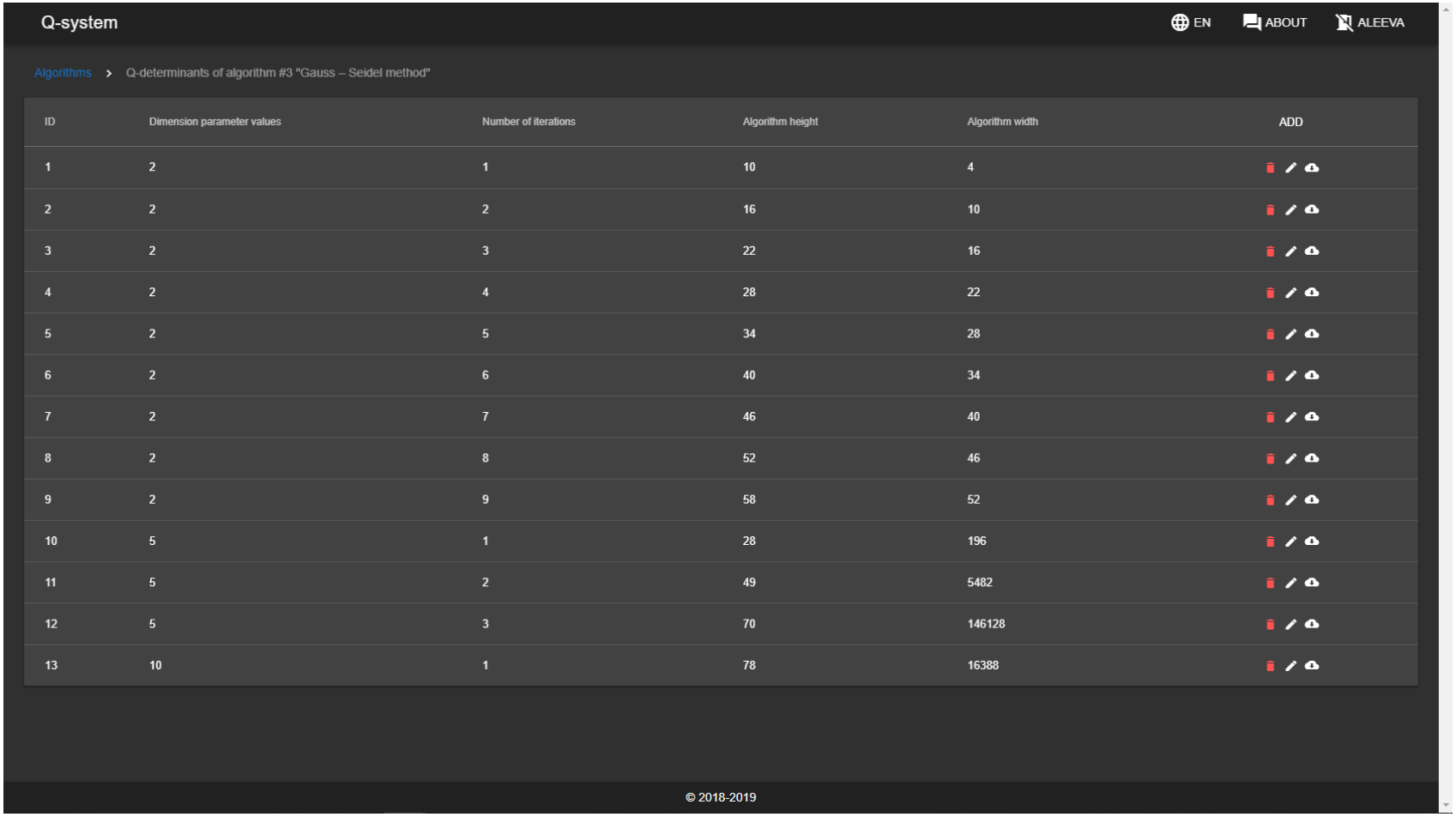


Рис.3. Главная страница клиентского приложения *Q*-системы



ID	Dimension parameter values	Number of iterations	Algorithm height	Algorithm width	ADD
1	2	1	10	4	
2	2	2	16	10	
3	2	3	22	16	
4	2	4	28	22	
5	2	5	34	28	
6	2	6	40	34	
7	2	7	46	40	
8	2	8	52	46	
9	2	9	58	52	
10	5	1	28	196	
11	5	2	49	5482	
12	5	3	70	146128	
13	10	1	78	16388	

Рис.4. Страница клиентского приложения Q-системы со списком Q-детерминантов и их характеристик

В монографии
Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002. 608 с.
на стр. 207 написано:
«Использование внутреннего параллелизма имеет очевидное достоинство, т.к. не нужно тратить дополнительные усилия на изучение вычислительных свойств вновь создаваемых алгоритмов. Недостатки также очевидны из-за необходимости определять и исследовать графы алгоритмов. В тех случаях, когда внутреннего параллелизма недостаточно для эффективного использования конкретного параллельного компьютера, приходится заменять его другим алгоритмом, имеющим лучшие свойства параллелизма. Правда, осуществить этот выбор не так легко, т.к. нужно знать параллельную структуру алгоритмов. А она-то как раз неизвестна. Поэтому понятно, насколько актуальными являются сведения о параллельных свойствах алгоритмов, а также знания, позволяющие эти сведения получать».

Концепция Q-детерминанта и основанная на ней Q-система решают поставленную проблему.

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

- Модель концепции Q-детерминанта дает возможность исследовать все машинно-независимые свойства численных алгоритмов, однако не учитывает особенности их выполнения на ПВС.
- В связи с этим модель была расширена путем добавления двух подмоделей, которые представляют собой модели параллельных вычислений *PRAM* и *BSP*, отражающие в абстрактной форме архитектуру ПВС с общей и с распределенной памятью соответственно.

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

На основе расширенной модели был предложен метод проектирования параллельной программы для выполнения Q-эффективной реализации численного алгоритма.

Метод состоит из трех этапов:

1. Построение Q-детерминанта алгоритма.
2. Описание Q-эффективной реализации алгоритма.
3. Если Q-эффективная реализация выполнима, то по ее описанию разрабатывается параллельная программа.

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

- Полученная с помощью метода программа называется *Q-эффективной*, а процесс ее создания *Q-эффективным программированием*.
- Q-эффективная программа полностью использует ресурс параллелизма алгоритма, так как выполняет его Q-эффективную реализацию.
- Таким образом, Q-эффективная программа имеет самый высокий параллелизм среди программ, реализующих алгоритм.
- По этой причине Q-эффективная программа использует ресурсы ПВС эффективнее, чем программы, выполняющие другие реализации.

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

Метод был апробирован на алгоритмах, Q-детерминанты которых содержат Q-термы различного типа, в их числе:

- алгоритм умножения плотных матриц (безусловные Q-термы),
- алгоритм умножения разреженных матриц (условные Q-термы),
- метод Гаусса–Жордана для решения СЛАУ (условные Q-термы),
- метод Якоби для решения СЛАУ (условные бесконечные Q-термы),
- метод Гаусса–Зейделя для решения СЛАУ (условные бесконечные Q-термы).

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

- Для перечисленных алгоритмов и длугих студентами ЮУрГУ разработаны Q-эффективные программы для общей и распределенной памяти.
- Использовался язык программирования C++.
- Для общей памяти применялась технология OpenMP, для распределенной MPI и OpenMP.
- Исследование проводилось на суперкомпьютере «Торнадо ЮУрГУ».
- Программы для общей памяти выполнялись на одном процессорном узле, для распределенной памяти на нескольких процессорных узлах.

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

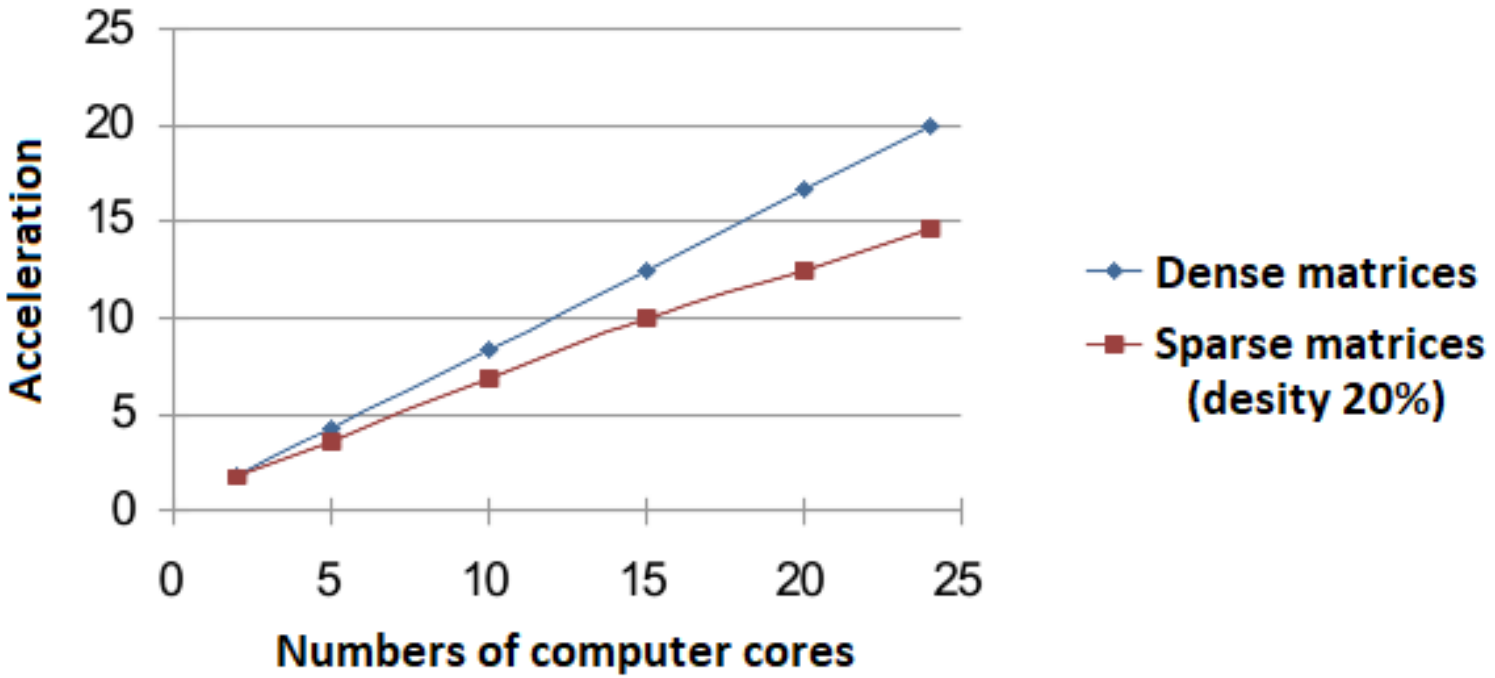


Рис.5. Ускорение Q-эффективных программ для алгоритмов умножения плотных и разреженных матриц для общей памяти

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

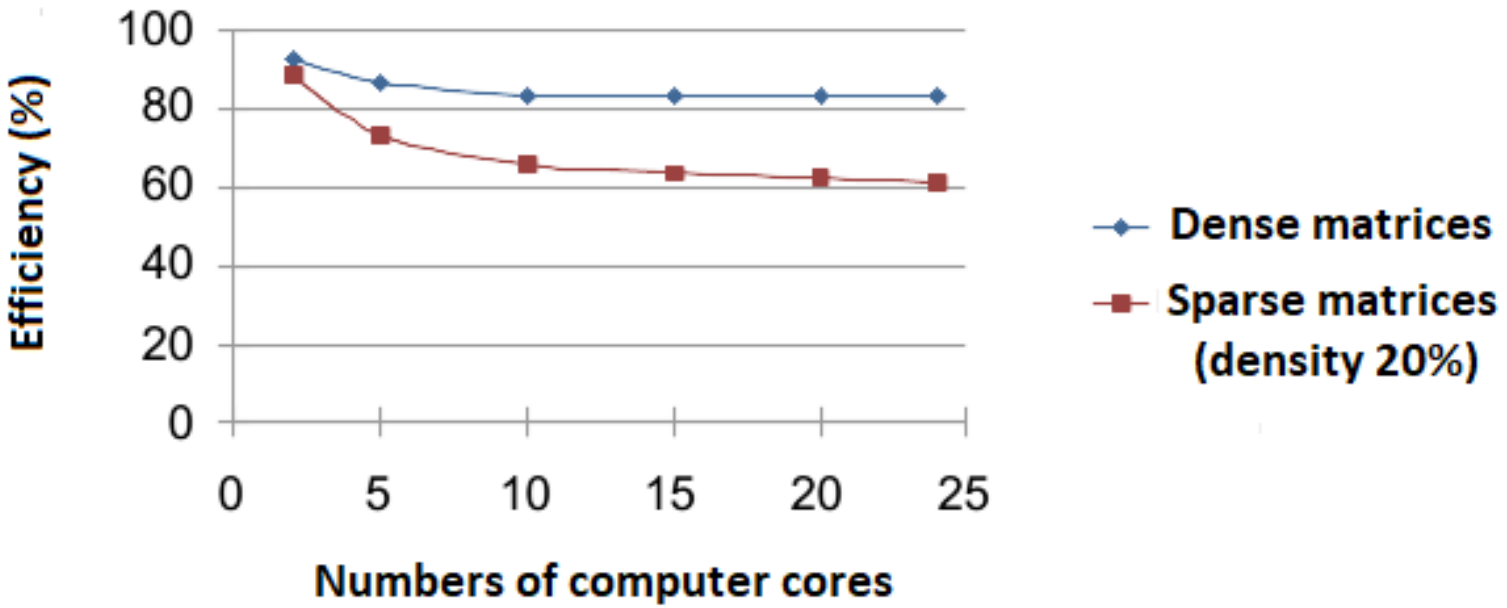


Рис.6. Эффективность Q-эффективных программ для алгоритмов умножения плотных и разреженных матриц для общей памяти

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

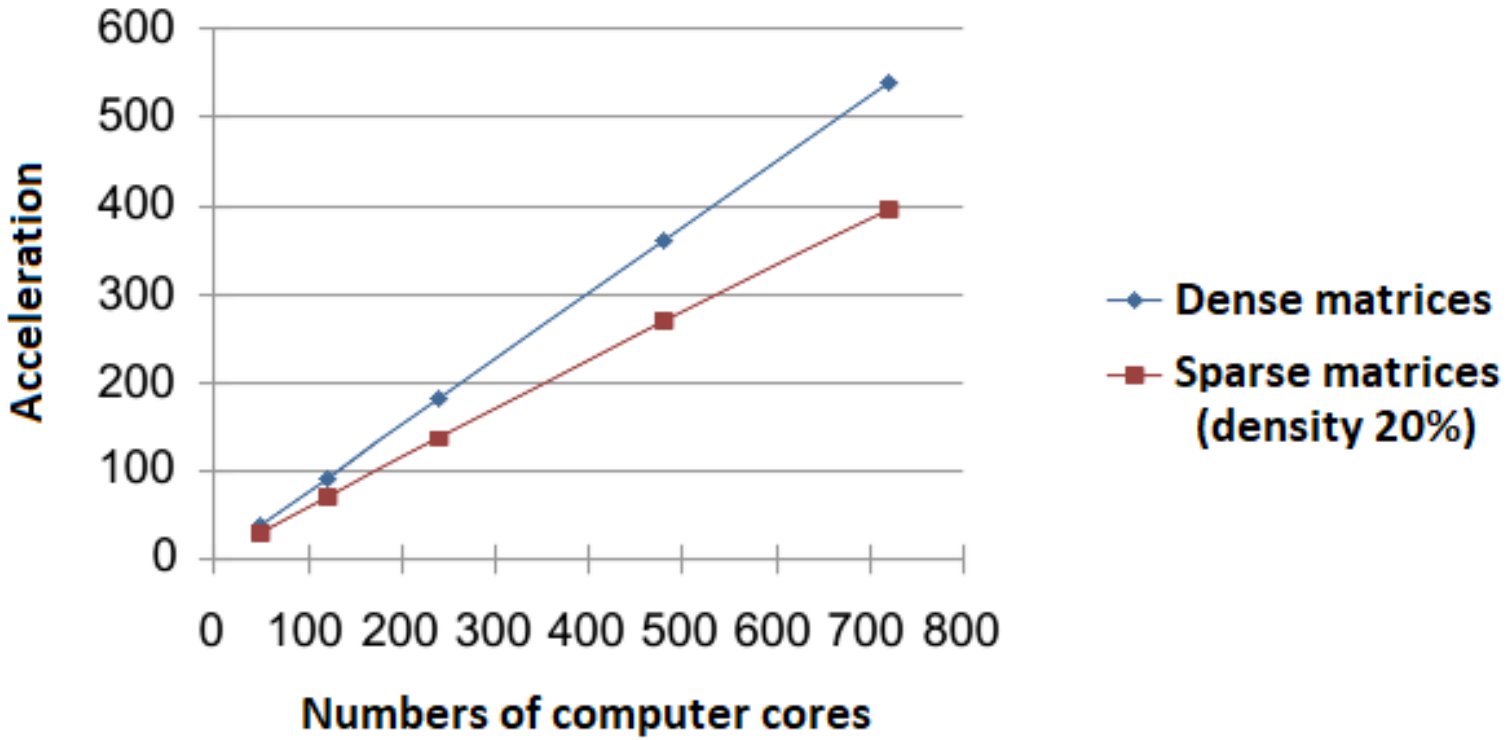


Рис.7. Ускорение Q-эффективных программ для алгоритмов умножения плотных и разреженных матриц для распределенной памяти

ЗАДАЧА 2. Проектирование программ, использующих ресурс параллелизма численных алгоритмов полностью

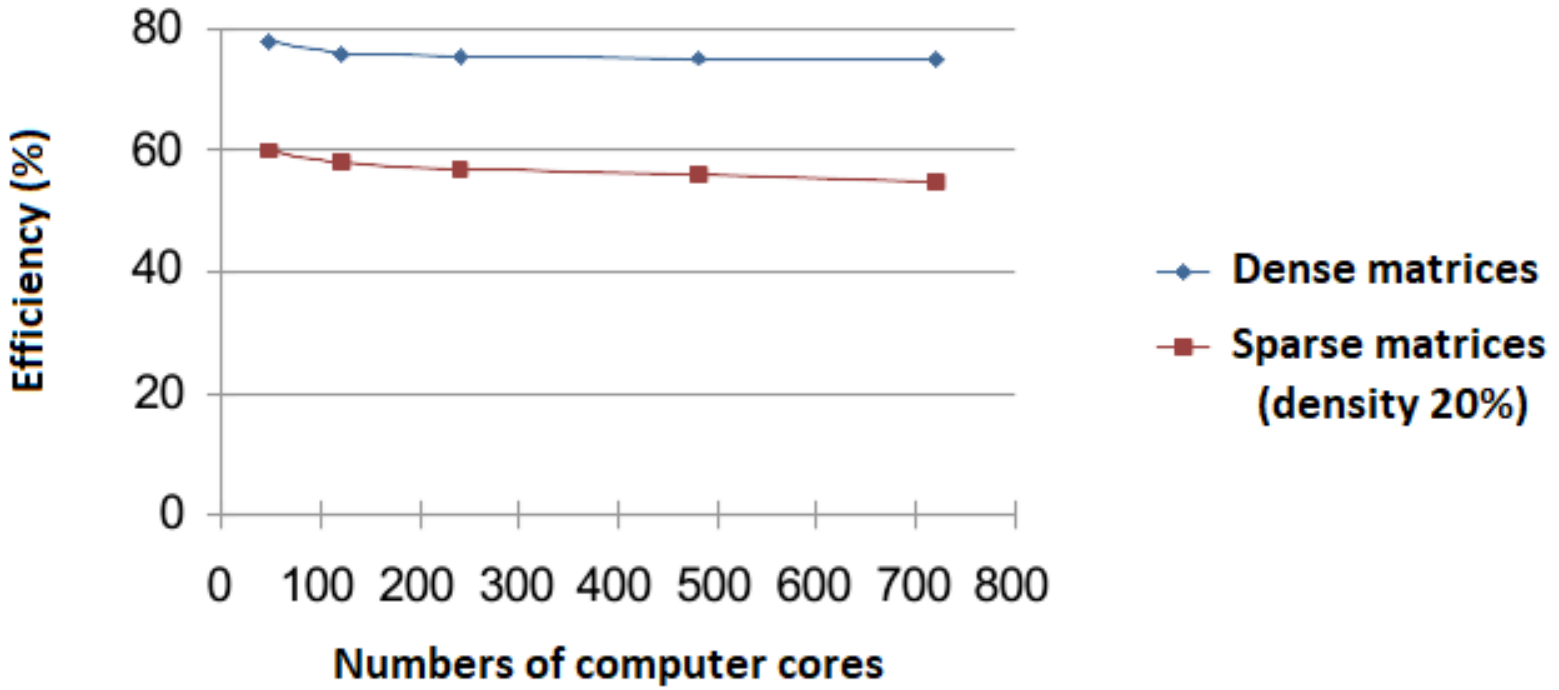


Рис.8. Эффективность Q-эффективных программ для алгоритмов умножения плотных и разреженных матриц для распределенной памяти

ЗАДАЧА 3. Повышение эффективности реализации алгоритмических проблем

Основные положения технологии повышения эффективности реализации алгоритмических проблем состоят в следующем.

1) Описание алгоритмической проблемы.
2) Определение методов решения алгоритмической проблемы.
3) Определение классов алгоритмов для реализации каждого из методов.
4) Исследование с помощью Q-системы ресурса параллелизма алгоритмов, составляющих классы алгоритмов для реализации методов, и выбор из них алгоритма с лучшей характеристикой параллельной сложности $D(\bar{N})$.
5) Разработка для выбранного алгоритма Q-эффективной программы.

Описанная технология названа Q-эффективным программированием в широком смысле.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Концепция Q-детерминанта дает возможность решить проблему повышения эффективности параллельных вычислений в случае численных алгоритмов, так как

Q-детерминант позволяет выразить и оценить имеющийся внутренний параллелизм любого численного алгоритма, а также показать способ его параллельного исполнения.

В результате получен ответ на вопрос Владимира Валентиновича Воеводина из доклада на ПаВТ'2016:
“Как выразить имеющийся параллелизм и показать возможный способ параллельного исполнения?”

Спасибо за внимание!