

Hartmut Schwandt

Parallele Numerik

Hartmut Schwandt

Parallele Numerik

Eine Einführung



Teubner

B. G. Teubner Stuttgart · Leipzig · Wiesbaden

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliographie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <<http://dnb.ddb.de>> abrufbar.

Prof. Dr. Hartmut Schwandt

Geboren 1953 in Berlin. Von 1973 bis 1977 Studium der Mathematik. 1981 Promotion, 1987 Habilitation an der Technischen Universität Berlin. Seit 1988 apl. Professor für Mathematik, Arbeitsgebiet Numerische Mathematik, an der TU Berlin. Leiter des EDV-Bereichs am Institut für Mathematik der TU Berlin.

1. Auflage Oktober 2003

Alle Rechte vorbehalten

© B. G. Teubner Verlag / GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden 2003

Der B. G. Teubner Verlag ist ein Unternehmen der Fachverlagsgruppe BertelsmannSpringer.
www.teubner.de



Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlags unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Umschlaggestaltung: Ulrike Weigel, www.CorporateDesignGroup.de
Gedruckt auf säurefreiem und chlorfrei gebleichtem Papier.

ISBN-13: 978-3-519-00379-3 e-ISBN-13: 978-3-322-80041-1

DOI: 10.1007/978-3-322-80041-1

Vorwort

Das vorliegende Buch ist aus einem Skript zu einer Vorlesung über Parallele Numerik entstanden, die vom Autor seit Ende der achtziger Jahre regelmäßig am Fachbereich Mathematik der Technischen Universität für Mathematiker, Informatiker sowie Studenten der Natur- und Ingenieurwissenschaften durchgeführt wurde.

Schon kurz nachdem Anfang bis Mitte der achtziger Jahre die ersten Vektorrechner für Universitäten zugänglich wurden, zeigte sich eine Lücke zwischen der klassischen Ausbildung in der Numerischen Mathematik, in der parallele Anwendungen sehr häufig als reines Programmierproblem angesehen wurden, und der Benutzerausbildung durch die Betreiber derartiger Rechner, die sich fast ausschließlich auf programmiertechnische Probleme beschränkte. Im Laufe der Zeit wurde eine Vielzahl von parallelen Verfahren und Algorithmen für die unterschiedlichsten Anwendungen entwickelt. Angesichts der Verfügbarkeit immer besserer Software sowohl im Bereich der Compiler als auch der Anwendungen trifft man heute häufig auf die Meinung, dass die effiziente Nutzung von Parallelität auf entsprechenden Rechnern im Wesentlichen mühelos und "per Knopfdruck" durch die Nutzung von fertigen Bibliotheksroutinen oder automatisch parallelisierenden und vektorisierenden Compilern erfolgen kann. Mit dem vorliegenden Buch wird beabsichtigt, dem Leser ein geschärftes diesbezügliches Problembewußtsein aus dem Blickwinkel der Numerischen Mathematik zu vermitteln.

Jede praxisorientierte parallele Anwendung ist stark von Hard- und Software der verwendeten Rechnerumgebung abhängig und ohne diese nicht sinnvoll zu bearbeiten. In diesem Buch wird daher versucht, zunächst eine Einführung zumindest in diejenigen Gesichtspunkte der Technologie von Parallel- und Vektorrechnern und in die Softwarekonzepte zur Unterstützung der Erkennung und Umsetzung paralleler Strukturen zu geben, die für parallele numerische Anwendungen unverzichtbar sind. Anhand grundlegender numerischer Probleme und Verfahren werden dann wesentliche Strategien und Konzepte der Parallelen Numerik beschrieben. Dabei ergibt sich zwangsläufig eine Beschränkung auf ausgewählte Themen. Mancher Leser wird ein von ihm als wichtig erachtetes Thema gar nicht vorfinden oder als nicht ausreichend gewürdigt ansehen. Dieses Buch kann und will weder in Konkurrenz zu den inzwischen recht zahlreichen Büchern über parallele Rechnertechnologien treten, noch eine in sich geschlossene Einführung in die Numerische Mathematik ersetzen. Die vorliegende Einführung in die Parallele Numerik soll die wesentlichen Grundlagen vermitteln und Anregungen für eine weitergehende Vertiefung im Einzelfall liefern. Insbesondere setzt dieses Buch in großen Teilen keine speziellen Kenntnisse voraus. Mit steigendem Schwierigkeitsgrad der mathematischen Verfahren in den Kapiteln 5 bis 7 sind Kenntnisse der Numerischen Mathematik und die Bereitschaft von Nutzen, sich in Verfahren einzuarbeiten, die über die Grundkenntnisse hinausgehen und hier nur knapp dargestellt werden können.

Die Komplexität und die Heterogenität des Themengebietes macht es oft unmöglich, im Einzelfall konkrete und allgemein verbindliche Wertungen der Güte von Verfahren und Algorithmen unter dem Gesichtspunkt der Parallelen Numerik zu geben. Dem Leser dieses Buches sei drin-

gend angeraten, die Lektüre durch eigene praktische Erfahrungen zu ergänzen.

Ausdrücklich danken möchte ich Herrn Prof. Dr. R.-D. Grigorieff, Frau Dipl.-Math. Annette Jäkel sowie Studenten meiner Vorlesung, deren kritische Durchsicht des Manuskripts zu vielen Verbesserungen geführt haben. Nicht zuletzt möchte ich dem Teubner-Verlag für die tatkräftige Unterstützung bei der Realisierung dieses Buchprojektes danken.

Berlin, im Juli 2003

Hartmut Schwandt

Inhalt

1	Einleitung	11
2	Einführende Beispiele und grundlegende Begriffe	18
2.1	Einführende Beispiele	18
2.2	Parallele Strukturen in Algorithmen	31
2.3	Parallelitätsbegriff	32
3	Parallelität in Rechnerarchitekturen und Softwarewerkzeuge zur Beschreibung paralleler Strukturen	35
3.1	Parallele Strukturen in Rechnerarchitekturen	35
3.1.1	Basiskomponenten einer Rechnerarchitektur	36
3.1.2	Sequentielle Rechner	42
3.1.3	Vektorrechner	44
3.1.3.1	Arithmetische und logische Einheiten	45
3.1.3.2	Aspekte der Speicherstruktur	51
3.1.3.3	Optimale Nutzung der Vektorprozessor-Architektur	54
3.1.4	Mikroprozessoren	60
3.1.4.1	Merkmale von RISC-Architekturen	60
3.1.4.2	Aspekte der Speicherstruktur	63
3.1.5	Parallelrechner	68
3.1.5.1	Prozessoren	69
3.1.5.2	Speichertopologie	69
3.1.5.3	Prozessorkopplung und Kommunikation	73
3.1.5.4	Besondere Parallelrechnerformen	77
3.1.6	Kontrollfluss und Programmiermodell als Klassifikationsmerkmal	84
3.1.7	Beispiele für Rechnerarchitekturen	84
3.1.7.1	Vektorrechner	85
3.1.7.2	Parallelrechner	94
3.1.7.3	Cluster	117
3.2	Unterstützende Software zur Parallelisierung, Vektorisierung und Optimierung	122
3.2.1	Parallele Programmiersprachen	122
3.2.2	Erweiterungen gängiger Programmiersprachen	123
3.2.3	Automatische Erkennung paralleler oder vektorieller Konstrukte und automatische Optimierung	125
3.2.4	Steuerung durch Direktiven	138
3.2.5	Unterprogramm-Bibliotheken zur Kommunikation und Synchronisation	141
3.2.6	Bibliotheken für Elementaralgorithmen	153
3.2.7	Softwarewerkzeuge zur Analyse	155
3.3	Einflüsse der Rechnerarchitektur auf die Entwicklung paralleler Anwendungen	155
3.3.1	Verfahrensauswahl	156

3.3.2	Algorithmenentwicklung	157
3.3.3	Programmentwicklung	162
3.4	Zeit, Leistung und Geschwindigkeit	170
3.4.1	Maßzahlen zur Leistungsbeschreibung	170
3.4.2	Zeitmessung	171
3.4.3	Leistungskriterien für Rechner	176
3.4.4	Leistungskriterien für numerische Anwendungen	186
3.4.5	Amdahls Gesetz	187
4	Basialgorithmen der linearen Algebra	192
4.1	Reduktionsoperationen	192
4.2	Vektor-Vektor-Operationen und Skalarprodukt	212
4.3	Matrix-Vektor-Operationen	214
4.3.1	Matrix-Vektor-Multiplikation für vollbesetzte Matrizen	214
4.3.2	Matrix-Vektor-Multiplikation für dünnbesetzte Matrizen und Bandmatrizen	223
4.4	Matrix-Matrix-Operationen	227
4.4.1	Grundformen der Matrix-Multiplikation	228
4.4.2	Blockalgorithmen zur Matrix-Multiplikation	236
4.4.3	Beispiel zur Einzelprozessor-Optimierung	241
4.5	Rekurrente Relationen und Differenzgleichungen	244
4.5.1	Allgemeine rekurrente Relationen	244
4.5.2	Lineare rekurrente Relationen und lineare Differenzgleichungen	246
4.5.2.1	Algorithmen für lineare rekurrente Relationen m-ter Ordnung	248
4.5.2.2	Algorithmen für lineare rekurrente Relationen niedriger Ordnung	253
5	Lineare Gleichungssysteme	258
5.1	Direkte Verfahren	259
5.1.1	Vollbesetzte Matrizen	259
5.1.1.1	Sequentieller Gauß-Algorithmus	259
5.1.1.2	Gauß-Algorithmus ohne Pivotsuche	263
5.1.1.3	Gauß-Algorithmus mit Pivotsuche	279
5.1.1.4	Gauß-Algorithmus ohne Pivotsuche für mehrere Systeme	288
5.1.1.5	Block-Gauß-Algorithmus	291
5.1.2	Dreieckssysteme	293
5.1.3	Allgemeine Bandmatrizen	294
5.1.3.1	Gauß-Algorithmus	294
5.1.3.2	Verallgemeinertes Verfahren von Wang	295
5.1.4	Tridiagonalmatrizen	299
5.1.4.1	Gauß-Algorithmus	300
5.1.4.2	Zyklische Reduktion	301
5.1.4.3	Kombination von Gauß-Algorithmus und Zyklischer Reduktion	311
5.1.4.4	Blockzerlegung – Verfahren von Wang und Modifikation von Johnsson	312
5.1.4.5	Schur-Komplement-Verfahren	316
5.1.4.6	Vergleich	323
5.1.5	Blocktridiagonalmatrizen	324
5.1.5.1	Blockzyklische Reduktion	327

5.1.5.2	Buneman-Algorithmus	329
5.1.5.3	Eigenwert-Eigenvektor-Zerlegung	341
5.1.5.4	FACR(I)-Algorithmus	344
5.1.5.5	Vergleich	344
5.2	Iterative Verfahren	345
5.2.1	Parallele Iterationsverfahren und Abbruchkriterien	347
5.2.2	Iterationsverfahren für lineare Gleichungssysteme	350
5.2.2.1	Zerlegungsverfahren	350
5.2.2.1.1	Relaxationsverfahren	353
5.2.2.1.2	Blockverfahren	360
5.2.2.1.3	Mehrfachzerlegungen	363
5.2.2.2	Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren)	367
5.2.2.3	Mehrgitterverfahren	375
5.2.3	Asynchrone Iterationsverfahren	384
6	Schnelle Fourier-Transformation	393
6.1	Problemstellung	393
6.2	Sequentielle Algorithmen	394
6.3	Vektorielle Algorithmen	402
6.4	Parallele Algorithmen	407
6.5	Mehrdimensionale FFT	412
6.6	Bemerkungen zu weiteren Algorithmen	414
6.7	Zahlentheoretische Transformation	416
7	Gebietszerlegung	417
7.1	Aufgabenstellung	417
7.2	Gebietszerlegung mit zwei Teilgebieten	418
7.3	Schur-Komplement-Verfahren	422
7.4	Schwarzsche Alternierende Prozedur und Multisplitting-Verfahren	435
A	Anhang	443
A.1	Bezeichnungen	443
A.2	Definitionen und Hilfsergebnisse	443
	Literaturverzeichnis	447
	Sachverzeichnis	455