

同步并行算法

蹇贤福 李晓梅 谢铁柱 著

TONGBU BING
SUANFA

同步并行算法

蹇贤福 李晓梅 谢铁柱 著

国防科技大学出版社

内 容 简 介

本书是由国防科技大学计算机研究所组织编写的,旨在介绍并行计算机上使用的并行算法。全书共分八章:并行计算机的一般介绍,并行算法的分类比较,相关问题的并行算法,几种基本求值过程,线性代数的并行计算,矩阵特征值问题和常微分方程的并行解及偏微分方程数值解等。

本书可作为计算数学或计算机软件专业的教材,也可作为使用流水线并行计算机的广大科技人员的参考书。

同 步 并 行 算 法

蹇贤福 李晓梅 谢铁柱 著

责任编辑 钟 平

封面设计 侯 云

国防科技大学出版社 出版

湖南省新华书店发行

国防科技大学印刷厂印装

*

开本: 787×1092 1/32 印张: 12 15/16 字数: 309千字
1986年8月第1版 1986年8月第1次印刷 印数: 0,001—3,000册
统一书号: 15415·013 定价: 2.67元

前 言

并行算法是七十年代初期随着并行计算机出现而发展起来的一门新兴学科。国外技术发达国家正大力开展并行计算机和并行算法的研究工作,并且每年召开一次国际并行处理会议,出版论文集。有关并行算法的论著,多数包含并行处理、并行体系结构、并行语言等,内容较为广泛。

在我国,随着并行流水线计算机研制工作的开展,从七十年代中期开始,逐步开展了对并行算法的研究,特别是银河亿次计算机 YH-1 投入使用以后,广大的计算机用户、计算数学工作者和工程技术人员,迫切需要了解和掌握并行算法的设计思想和计算方法。但时至今日,国内尚未出版有全面论述并行算法的教材。作为教学和实际应用的参考,我们结合近年来教学和科研实践,在原有讲义的基础上,参照国内外近年来出版的有关并行算法的论著,编写了这本教材。本书概要介绍了并行计算机的特点和分类;从几个方面阐明了并行算法的基本方法和内容,结合在银河机上的计算实践,对某些典型的算法及其并行效率进行了分析。这将有助于掌握并行算法的基本思想,提高运算速度,发挥并行机的效率,推广使用并行算法。实践表明,传统的串行算法,不适合于在并行机上运行,必须按并行的原则加以改造,否则会导致运算效率大幅度下降,使亿次机降为百万次机。

本书第一章是并行计算机的一般介绍,列举了几种不同类型的并行计算机。如阵列机、流水线机等,将有助于读者了解并行机的一般特点。第二章对算法进行了分类比较,论述了评

I

价算法性能的一般方法。第三章介绍相关问题的并行计算，这是算法入门和基础部分。第四章介绍几种基本的求值过程，它们在一般数值计算中可能要用到。第五、六章介绍的线性代数和特征值问题，是并行算法研究的一个重要领域。第七、八章分别介绍并行算法在常微分方程和偏微分方程数值解方面的应用。

本书第一、二章由蹇贤福同志编写，第三、五、六章由谢铁柱同志编写，第四、七、八章由李晓梅同志编写。

国防科技大学慈云桂教授和陈火旺教授对本书的编写和出版，提出了许多宝贵意见，并给予大力支持和帮助，在此表示衷心的感谢。

限于我们的学识和经验，加上编写时间仓促，书中缺点错误在所难免，敬请读者批评指正。

编 者

一九八五年十月

目 录

第一章 并行计算机的一般介绍

§1.1 引言	1
§1.2 改进计算机性能的重要途径	3
§1.3 计算机系统的分类	6
§1.4 国外并行计算机发展动向	10
§1.5 ILLIAC-IV	16
§1.6 STAR-100	23
§1.7 CRAY-1	29

第二章 并行算法的分类比较

§2.1 数学问题	40
§2.2 串行算法与并行算法的比较	45
§2.3 并行计算机与并行算法性能评价中的几个基本概念	49
§2.4 算法复杂性	56

第三章 相关问题的并行计算

§3.1 递归问题	63
§3.2 迭加问题	92
§3.3 多项式的并行计算	99
§3.4 三角形方程组的并行求解	114

第四章 几种基本求值过程的并行算法

§4.1 分析树与求和算法	128
§4.2 一般算术表达式的并行计算	134
§4.3 求根问题	156

IV

§4.4 并行插值·····	159
§4.5 样条函数·····	165
§4.6 FFT的并行计算·····	176

第五章 线性代数的并行算法

§5.1 矩阵乘法·····	198
§5.2 稠密线性方程组·····	204
§5.3 三对角线方程组·····	242
§5.4 稀疏与块三对角方程组·····	256

第六章 矩阵特征值问题

§6.1 Jacobi方法·····	264
§6.2 Givens-Householder 算法·····	274
§6.3 Householder 算法·····	279
§6.4 并行QR 算法·····	284
§6.5 Hyman 算法·····	303

第七章 常微分方程的并行数值解法

§7.1 块隐含一步法·····	309
§7.2 迭代法·····	315
§7.3 分段并行积分法·····	318
§7.4 两点边值问题的并行打靶法·····	323

第八章 偏微分方程的并行数值解法

§8.1 一维热传导方程的几种差分格式·····	330
§8.2 差分格式的统一式和并行处理·····	340
§8.3 二维波动方程差分格式的并行计算·····	355
§8.4 Poisson 方程五点格式的向量处理·····	358
§8.5 跨音速流差分格式向量化·····	362
§8.6 二维张量程序并行计算·····	379

参考文献·····	406
-----------	-----

第一章 并行计算机的一般介绍

§ 1.1 引言

世界上第一台电子数字计算机问世已有四十余年的历史。在这短短的四十年中，特别是最近十多年由于半导体技术的发展和工艺水平的提高，促使各类计算机迅速更新换代。计算机元件从电子管、晶体管发展到了大规模和超大规模集成电路，系统结构日趋复杂，性能价格比不断提高。

早期的计算机体积大、内存小、速度低，没有什么系统软件，靠手编机器代码程序算题既费时又易出错。为了提高计算机的性能，通过改进系统结构、更换计算机元器件来增加运算速度已收到明显效果。在系统软件方面采用硬件资源集中管理统一分配和多道程序分时操作等措施使计算机利用率大幅度提高，这意味着软件投资比硬件更加合算，因此大力开发软件资源势在必行。在当今的计算机行业中，高级算法语言、操作系统、应用软件等计算机软件正在迅速发展，日益丰富和完善并已成为计算机系统中不可分割的一部分。

人们对计算机的要求是无止境的。到目前为止，由于计算机元件物理条件的限制，要进一步提高单机门电路速度已十分困难。为适应科学技术的发展，十多年来计算机的总体结构发生了很大变化，出现了运算流水线、多运算器、多功能部件和多处理机系统，使计算机的数值计算和数据处理能力大大加强。与此同时对于单处理机在结构上也采取了许多措施，如存

儲器多模块结构交叉访问、指令先行控制、超高速缓冲存貯器、多功能部件和多通用寄存器广泛使用以及流水线向量链接技术等，使单处理机的运算速度也可以达到每秒一亿次以上。

目前世界各国投入运行的计算机，从微型计算机，大、中、小型计算机到巨型计算机，各种型号应有尽有，按其系统结构大致可划分为串行计算机和并行计算机两大类。而并行计算机又可细分为阵列机、流水线机和多处理机等。ILLIAC-IV (1966~1973)，CRAY-1 (1972~1976) 和 S-1 (1976~1984) 可作为上述三种并行计算机的代表。我国研制的属于流水线型的757机和YH-1机已交付使用，这不仅标志着我国已进入世界计算机的先进行列，而且对于发展我国的科学技术和计算机事业是一个巨大的推动。

并行计算机的主要特点是对数据作批量处理，即进行数组或向量运算，这与串行计算机的数据加工方式完全不同。传统的（串行）计算方法很不适合在并行机上运行，必须加以改造以提高算法的并行性。如果一个算法的并行性不好，就会使并行机的效率大幅度下降，从亿次机降为百万次机。正因为如此，七十年代初期，随着并行机的广泛使用，一门崭新的学科——并行算法迅速发展起来了。

并行算法的研究只有十多年时间，在我国才刚刚开始，很多问题急待解决，因此大力开展并行算法的研究特别重要。设计并行算法首先需要对并行计算机系统结构有一定的了解，算法对于计算工具的依赖性是人所共知的。我们将会看到，串行计算方法不可能在并行计算机上高效运行，就并行计算方法而言，差别也是很大的。适合于流水线计算机的算法不一定适合于多处理机，反之亦然。这就是说，一个好的计算方法必须充分利用计算机的结构特征和面向具体的服务对象。

算法既然依赖于计算工具，反过来又对计算工具的发展起

着一定的推动作用。如早期的并行计算机 ILLIAC-IV, 8×8 阵列的64台单处理机同时工作时, 平均运算速度接近于单处理机的64倍, 可达每秒一亿五千万次, 满足了速度要求。但建立在这种数据分散存储方式上的并行算法其计算格式比较复杂, 因为该机的总体结构使得各处理机之间的数据调度和传输都很费时间, 加之 ILLIAC-IV 的硬件采用分立元件致使设备量达到惊人的地步。也许是由于这些原因, ILLIAC-IV 阵列机至今只生产了一台。为了克服上述矛盾, 1978年美国鲍勒斯公司研制了BSP科学处理机。该并行计算机的16个完全相同的运算单元(AE)通过十字交叉的互连网络直接与17个存储体相连, 实现了对存储器的无冲突访问。然而实现共享多体并行存储器的互连网络结构非常复杂, 当处理单元个数增加时所需元件急剧增加。STAR-100, CRAY-1等向量流水线计算机采用公共存储体结构, 较好的解决了数据传输问题。

§1.2 改进计算机性能的重要途径

近年来, 随着科学技术和计算机工业的发展, 各类计算机的性能也不断得到改善, 其中以运算速度的提高尤为显著。例如美国正在研制的CRAY-2S系统, 运算速度可达每秒十亿次。

当代计算机系统的性能指标不完全取决于硬件本身, 而与计算机软件和建立在软硬件基础上的算法密切相关。系统软件和应用软件已成为计算机系统中不可缺少的部分而投入市场, 其价格不断上升。因此改善计算机硬件、软件和算法是提高计算机功能与效率的重要途径。

硬件性能的提高依赖于元器件与系统结构。早期的电子计算机体积大、速度低、可靠性差, 系统结构也很简单。如世界

上第一台电子计算机ENIAC用了18000个电子管,重30T,功耗150kw,占地面积170m²,而它只有20个由电子管构成的寄存器作为存储器和312byte的外接可变只读存储器,以连线的方法来安排计算程序,修改或改换程序要重新连线。它的字长为十进制10bit,运算速度是加法0.2ms,乘法3.8ms,除法6ms。不到三十年工夫,基本元件从电子管、晶体管发展到了大规模集成电路,使计算机运算速度以指数方式迅速增长。根据目前集成工艺发展趋势,集成电路的速度和集成度还在继续提高,但是速度和集成度的提高总是受物理条件和工艺水平限制的,也许短期内不会有重大突破。相反,人们从改进计算机软、硬件系统结构入手,实现了单机或多机的并行处理。可以说在提高计算机系统运算速度方面已获得了很大的成功。

十多年来由于计算机元器件价格不断下跌,使得通过增加元件数量以及多体存储器交叉访问,多通用寄存器,多功能部件,指令先行控制,流水线向量链接等技术的综合应用,单处理机的运算速度超过了每秒一亿次。因此提高单处理机的性能仍然是当前计算机发展的主流。另一方面从系统结构上看,联合多台单机构成多处理机系统使它们互相配合协调工作,可以获得更高的运算速度。例如由美国能源部主持加州大学和斯坦福大学合作研制的S-1系统,由16台性能与CRAY-1系统相当的单处理机构成,其运算速度约为每秒十亿次。美国的计算空气动力学仿真系统NASF运算速度在每秒十亿次以上。正在研究的多处理机系统都声称要从双处理机系统或四处理机系统做起。CRAYX-MP为双处理机系统,HEP和CRAY-2是四处理机系统。

多处理机系统是以多台单处理机并行工作的结构来提高系统运算能力的,它们或者是共同完成一个课题的计算,或者是各自独立计算一个小课题,既灵活又有较高的性能价格比,受

到计算机专家们的普遍重视。可见进一步提高运算速度采用多处理机体系结构仍将是今后巨型计算机发展的必然趋势。然而单纯依靠增加处理机数目来获得高速度不一定合适。因为在多机系统中,各单处理机之间是通过互连网络来实现机间数据交换和协调工作的。随着单处理机数目的加大互连网络的复杂程度将急剧增加。另一方面从系统使用效率来看,对于一个有 n 台单处理机的多机系统,如果有的作业由所有处理机同时完成,这时系统使用效率最高,总性能为单处理机性能的 n 倍。如果有的作业只由一台处理机完成其余处理机闲着,系统使用效率最低,总性能相当于单处理机性能。在科学与工程计算中总有低效与高效的情况,就整个系统的使用效率而言,采用数目少的高速处理机组成的多处理机系统比采用数目多的低速处理机组成的多处理机系统要优越,因此就通用计算机系统来说,要提高计算机速度最有希望的是由数量较少的超高性能的单处理机所构成的多处理机系统。

计算技术和计算机的发展是相互促进的。为了提高运算速度,充分发挥硬件结构的功能,必须要有与此相适应的并行化的软件系统。五十年代末期,多道程序操作系统已在一些大机器上采用。现在多道程序和分时操作技术已从单处理机向多处理机推广,它按照硬件结构的特点,以最佳利用系统资源的方式,高效地管理和分配系统资源,控制用户程序运行。一般并行计算机都配备有功能较强的向量FORTRAN语言编译器,它含有优化功能和具有向量识别能力,能分析标量FORTRAN程序,自动识别隐藏在串行程序里的并行成份,将源程序中能够向量化的部分进行向量化,编译成能有效利用向量指令的目标程序。并行算法的研究受到人们的极大重视,已成为高效利用并行计算机的重要手段。美国、日本等许多科学技术发达的国家正在大力开展并行算法、并行处理和支持并行处理的软件的

研究、探索并行计算机新体系结构，并且每年都要召开一次国际并行处理会议。

总而言之，提高计算机性能的基本思想在于提高它的运算并行性。所谓并行性严格说来有两种含义^[1]：一是同时性，指两个或多个事件在同一时刻发生，正如在阵列处理机ILLIAC-IV中看到的那样；二是并发性，指两个或多个事件在同一时间间隔内发生，这种情况，在各种并行流水线处理机中可以看到。

并行可以粗略地划分为位级并行、运算级并行和算法级并行。今后我们将集中讨论算法级并行。

§1.3 计算机系统的分类

各类计算机按其规模和功能可分为微型机、中小型机、大型机和巨型机，或者按其数据加工方式可分为串行机和并行机。由于系统结构的不同，并行机又可分为阵列式处理机、向量流水线式处理机和多处理机等。不管是哪种类型的计算机都是为适应科学计算或工程任务的需要而设计的。

计算机可以按不同的原则进行分类。常见的有四种分类方法，即按指令流和数据流的弗林 (M.J.Flynn) 分类法，按指令流和执行流的库克 (D.J.Kuck) 分类法，按并行度的冯泽云 (Tse Yun Feng) 分类法，按并行度和流水线的汉德勒 (W.Handler) 分类法^[2]。其中按指令流和数据流的性质来划分的弗林分类法比较直观易于接受。为叙述方便先给出如下术语：

程序：由逐条机器指令构成的序列。

指令流：一个计算程序的指令，从某一条开始，按实际计算过程展开所构成的一个有序集合。

单指令流(SI)：任意两条指令都是有序指令的指令流。

多指令流(MI)：含有多个可同时独立计算的单指令流的指令流。

数据流：指令流中指令调用的数据序列（包括输入数据和中间结果）。

单数据流(SD)：对于指令流中的每一单目或多目运算只有一个输出结果的数据流。

多数据(MD)：对于指令流中的每一单目或多目运算有多个输出结果的数据流。

对某一操作运算而言，如果参与运算的源操作数只有一个，则称这种操作运算为单目运算，否则称为多目运算。

这里给出的指令流和数据流的定义不是很严格，但是从指令流和数据流的概念出发可以区分出各种类型计算机的结构和计算特征。

利用指令与数据的单流和多流的概念形式上可导致四个范畴的计算机结构，它们是：

单指令流—单数据流(SISD)

单指令流—多数据流(SIMD)

多指令流—单数据流(MISD)

多指令流—多数据流(MIMD)

从而还可给出定义：

串行计算：单指令流—单数据流的计算方式。

串行计算机：按串行计算方式进行计算的计算机。

并行计算：单指令流—多数据流或多指令流—多数据流的计算方式。

并行计算机：按并行计算方式进行计算的计算机。

串行计算机只能作标量运算，即对单个或一对数据进行操作运算，故有时被称为标量计算机。并行计算机则以向量（或

数组) 运算为主, 兼顾标量运算, 因而又可称为向量计算机。

由此看出: 串行计算机属于SISD系统。这种类型的计算机结构可以各有不同。例如, 可有单个或多个并行存储体, 可有单个或多个功能部件, 但其指令部件只能在上一条指令执行完毕后才能允许下一条指令流出, 并且每执行一条指令只对一个操作部件提供源操作数。SISD的结构模式如下:

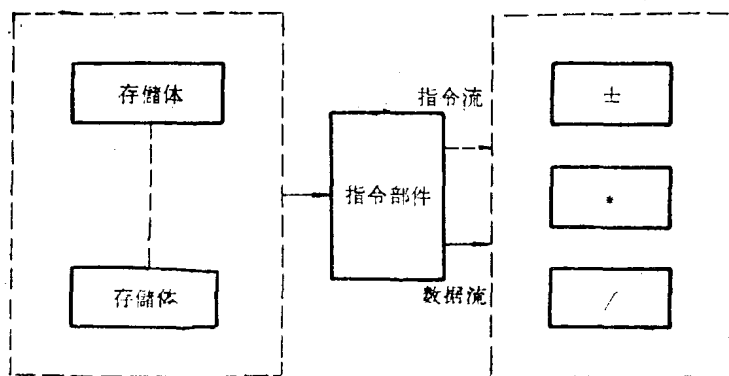


图1.1 SISD系统

属于SIMD、MISD及MIMD系统的计算机, 它们的系统结构可以相差很大甚至完全不同, 但它们由于指令执行时间的重迭或由于各处理部件的同步运行而实现了并行操作。为与串行计算机区别起见, 我们统称为并行计算机。

SIMD系统的一个典型代表是阵列式处理机。如ILLIAC-IV, 它的构成 8×8 阵列的64个独立处理单元在一台中央控制机B6700控制下同步工作。这一类型计算机的主要特点是各处理单元的指令来自中央处理部件, 每一个处理单元在同一时刻执行同一指令但使用不同的操作数据。SIMD的典型结构如图1.2所示。

有的文献^[3]把向量流水线计算机划入MISD类, 按照弗

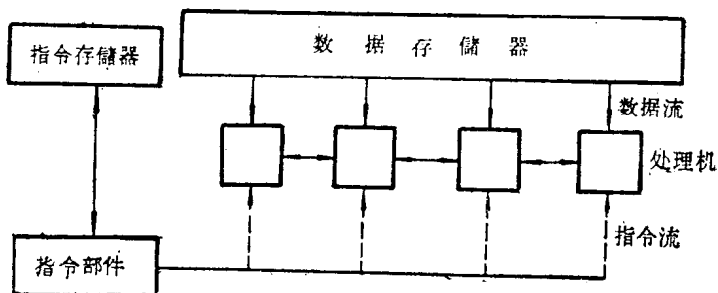


图1.2 SIMD系统

林的观点是不甚符合的。我们认为根据上述指令流和数据流的概念，把向量流水线计算机并入SIMD类较为恰当。目前MISD系统代表何种计算机尚有争议，实际上也很少有人对MISD的系统结构和适用性进行认真地研究。

属于MIMD系统的计算机称为多处理机。它是在整体控制下由两个或多个具有独立运算功能的处理机组成。各处理机在同一时刻执行不同的指令，指令来自处理机本身，各处理机不一定要同步运算。复杂的程序被分成若干可独立运行的程序，在不同的处理机上分别执行并相互交换信息，因而实现了任务、指令、数组各个级别的全面并行计算。

在弗林的四种类型结构的计算机中可以看到，沒有一种结构被认为是最优的。因为任何一部计算机不论是专用的还是通用的，我们总可以找到这样的一些问题和算法，使得在计算机上运行时有的是高效，有的则是低效。目前世界上投入运行的并行计算机中很多都属于SIMD，如ILLIAC-IV，BSP，STAR-100，CRAY-1，757，YH-1等。还有属于MIMD的，如Univac1108，HEP，S-1等。鉴于上述情况，今后我们将着重于讨论SIMD系统及其有关的算法而很少涉及MIMD系统，这并不是说SIMD系统比MIMD系统更好，因为MIMD所面临的

问题似乎比SIMD所面临的问题更难解决,而建立在MIMD系统上的(异步)并行算法比建立在SIMD上的(同步)并行算法更加复杂。异步并行算法与MIMD系统的发展密切相关,虽然MIMD系统的发展还处于初级阶段,但它开创了并行计算机发展的新方向,并行算法很可能沿着这个方向发展。目前我国已经开始了异步并行算法的研究且已取得较大的成就。

§1.4 国外并行计算机发展动向

并行计算机是各类计算机中性能最好、功能最强的计算机,它具有巨大的数值计算和数据处理的能力,专门用来解决那些在一般大型计算机上解决不了的科学计算、工程设计或数据处理问题。核武器设计、地质勘探、气象预报、实时跟踪、图象识别、数据管理等都需要高速度大容量的计算机。SISD计算机系统的改进所获得的速度提高远远赶不上需要。六十年代中期,美国就开始了并行计算机的研制工作,七十年代陆续研制成功若干种通用或专用并行计算机,如ILLIAC-IV、STAR-100、ASC、CRAY-1以及STARAN、PEPE等。典型的几种并行计算机的主要性能、生产和使用情况如表1.1所示。

CRAY-1S系列计算机是美国CRAY公司于1978年在CRAY-1计算机的基础上发展起来的,根据不同用途选择不同的存储容量和不同的I/O子系统,可以配置适合该用途的最佳系统。截止1981年8月CRAY-1S系列计算机已生产了25台。

CYBER203是美国CDC公司继STAR-100之后于1980年推出的新机种。它和STAR-100相比,主要改进如下:

(1) 提高了CPU逻辑电路的集成度。每片LSI芯片包含168个逻辑门,每个门的平均级延迟为0.8ns。

(2) 用半导体存储器代替磁心存储器。采用1Kbit/片双极