Uma experiência com o cluster SEARCH

Carlos Alberto Campos
Rui Manuel da Silva Ralha

Centro de Matemática
Universidade do Minho
Workshop – Braga – 21/Abril/2006

ccampos@estg.ipleiria.pt
r_ralha@math.uminho.pt

Contexto

- Primeiro contacto com o cluster SEARCH
- Objectivos
  - Configurar o ambiente de trabalho para a utilização do cluster
    - Implementações desenvolvidas em Fortran 90
    - Uso das bibliotecas numéricas LAPACK e ScaLAPACK
  - Comprovar a instalação do software
  - Utilização do cluster para processamento massivo
    - Obtenção de resultados das implementações desenvolvidas
    - Comparação de resultados com os obtidos nos clusters da Universidade Politécnica de Valência

Conteúdo (I)

- Configuração do ambiente de trabalho
  - Ambiente Windows
  - Ambiente Unix
- Acesso ao cluster SEARCH
  - Acesso a search.di.uminho.pt
  - "Visita guiada"
- Experiências com BLAS, LAPACK e ScaLAPACK
- Alguns tópicos adicionais

Conteúdo (II)

- BLAS
  - Apresentação da especificação
  - Programação de exemplos
    - Fase de implementação
      - Produto interno e norma (BLAS-1)
      - Produto matriz-vector (BLAS-2)
      - Produto matriz-matriz (BLAS-3)
    - Fase de compilação
    - Fase de execução
    - Deteção de erros

Conteúdo (III)

- LAPACK
  - Apresentação da biblioteca
  - Experiências com rotinas *driver*
    - Resolução de sistemas de equações lineares
    - Cálculo da decomposição em valores singulares
  - Experiências com rotinas computacionais
    - Cálculo da decomposição QR de uma matriz
    - Redução de uma matriz à forma bidiagonal superior
  - Programação de exemplos

Conteúdo (IV)

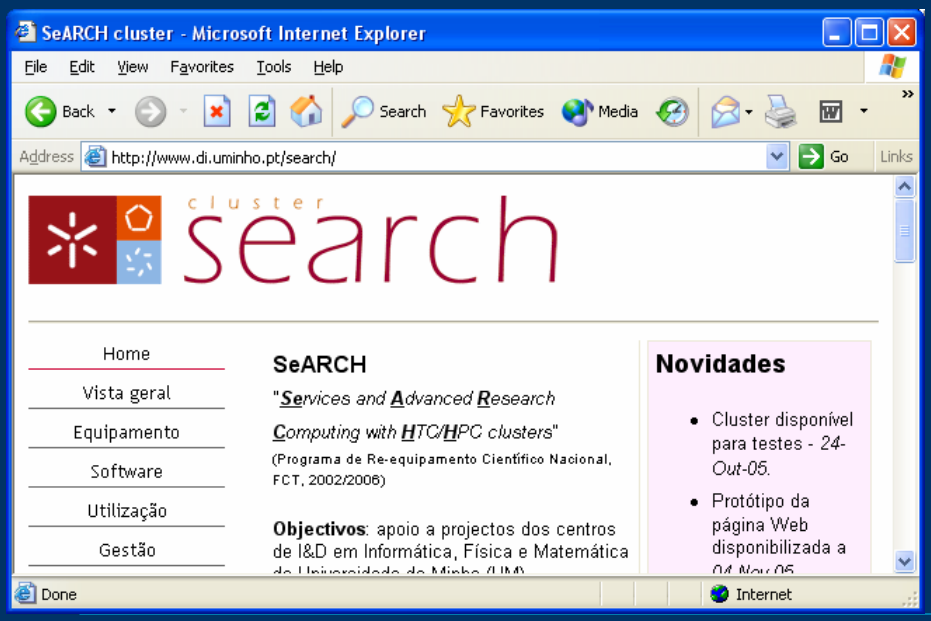
- ScaLAPACK
  - Apresentação da biblioteca
  - Experiências computacionais
    - Redução de uma matriz à forma bidiagonal superior
    - Cálculo da decomposição em valores singulares
  - Programação de exemplos
- Alguns tópicos adicionais
  - Exemplos com MPI (Message Passing Interface)
  - Exemplo de um algoritmo orientado a blocos matriciais

Ambiente de Trabalho

Ambiente Windows
Ambiente Unix

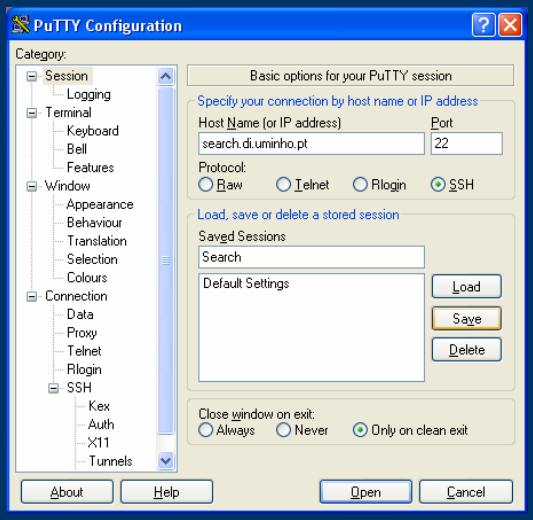
Ambiente Windows (I)

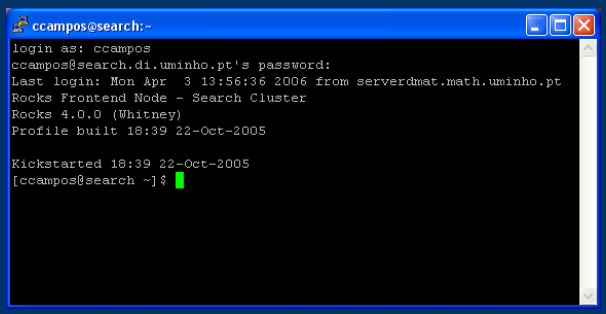
- Endereço Web
  - www.di.uminho.pt/search



Ambiente Windows (II)

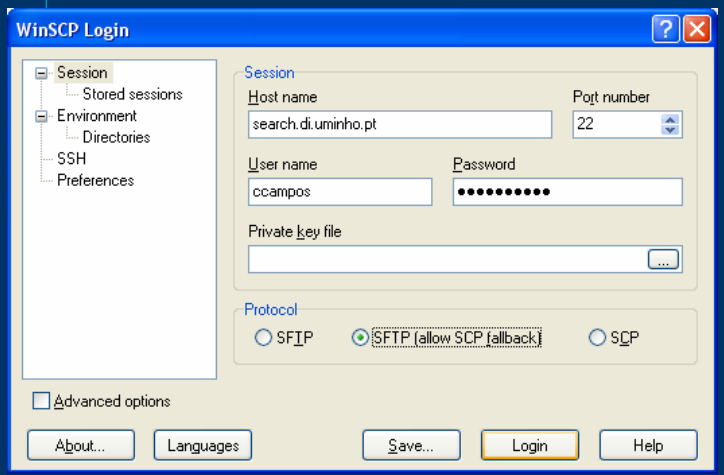
- Instalar sistema SSH / PuTTY
  - http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty
- Criar uma sessão com PuTTY

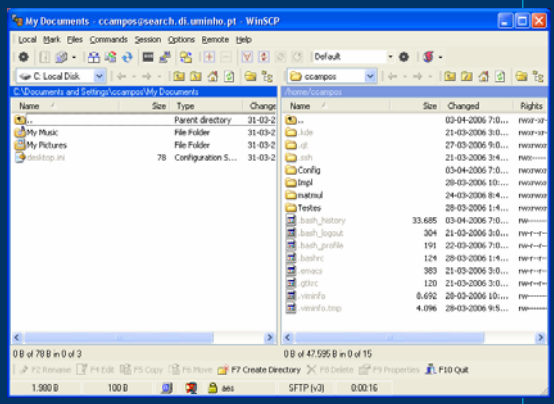




Ambiente Windows (III)

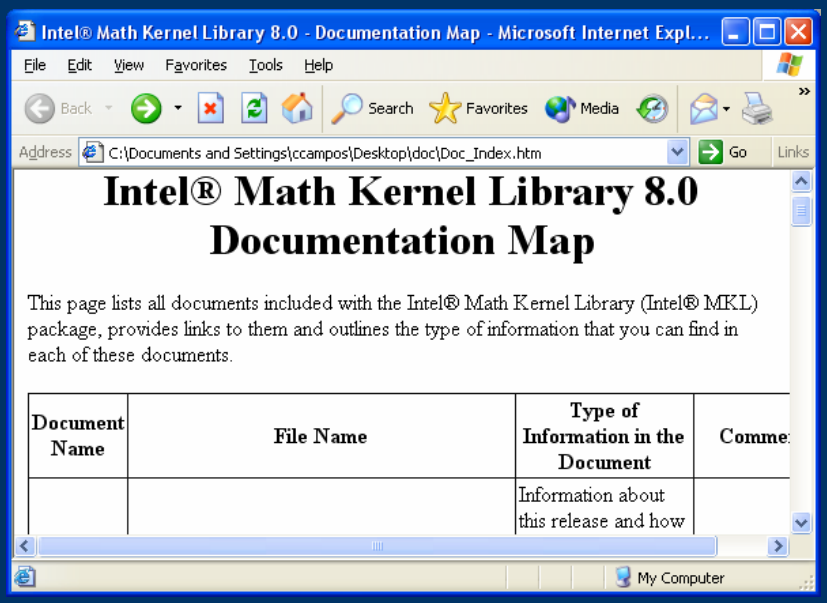
- Instalar sistema FTP / WinSCP
  - http://winscp.net/
- Criar uma sessão com WinSCP





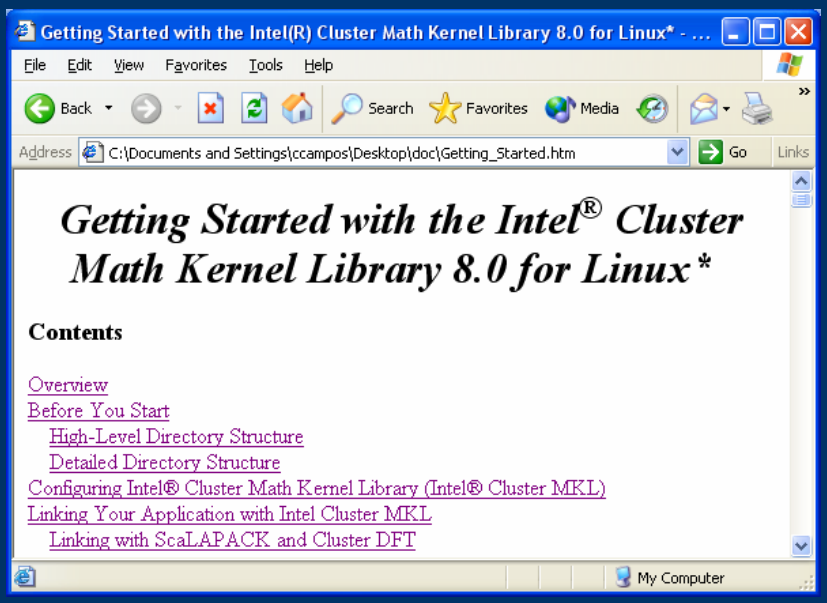
Ambiente Unix (I)

- Documentação inicial
  - /opt/intel/cmkl/8.0/doc/Doc_Index.htm



Ambiente Unix (II)

- Documentação inicial
  - /opt/intel/cmkl/8.0/doc/Getting_Started.htm



Ambiente Unix (III)

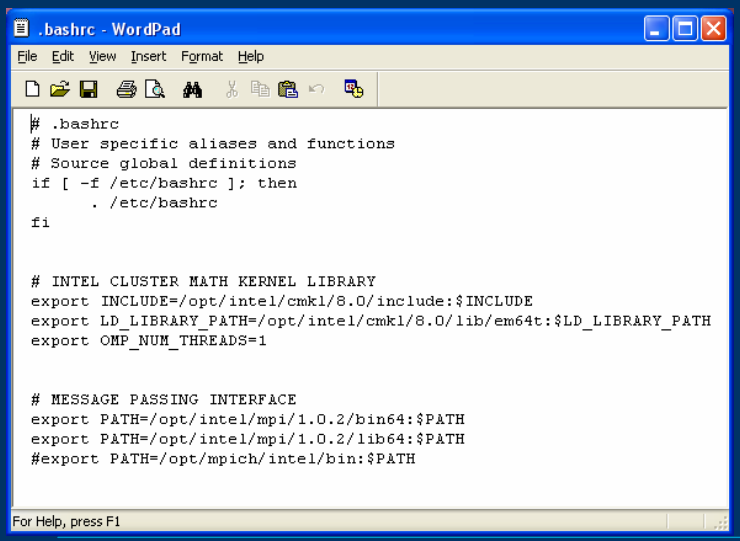
- Variáveis de ambiente de CMKL
  - /opt/intel/cmkl/8.0/tools/environment
    - Ficheiro mklvarsem64t.sh
      - Variável INCLUDE
        - export INCLUDE=/opt/intel/cmkl/8.0/include:$INCLUDE
      - Variável LD_LIBRARY_PATH
        - export LD_LIBRARY_PATH=/opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t:$LD_LIBRARY_PATH
- Variável de execução de CMKL
  - Configuração do número de *threads*
    - Variável OMP_NUM_THREADS
      - export OMP_NUM_THREADS=1

Ambiente Unix (IV)

- Variável de ambiente de MPI
  - /opt/intel/mpi/1.0.2
    - Configuração do acesso
      - Variável PATH
        - export PATH=/opt/intel/mpi/1.0.2/bin64:$PATH
        - export PATH=/opt/intel/mpi/1.0.2/lib64:$PATH
- Como configurar?
  - Inserir o código no ficheiro .bashrc

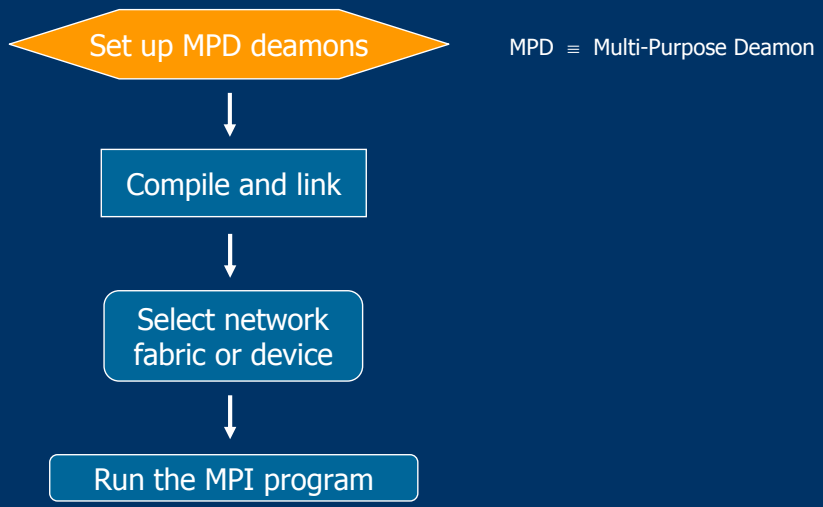
Ambiente Unix (V)

- Ficheiro .bashrc
  - Cluster Math Kernel Library : /opt/intel/cmkl/8.0/
  - Message Passing Interface : /opt/intel/mpi/1.0.2



Ambiente Unix (VI)

- Uso de Intel® MPI
  - /opt/intel/mpi/1.0.2/doc/Getting_Started.pdf
    - Trabalhar com a biblioteca Intel® MPI



Ambiente Unix (VII)

- Uso de Intel® MPI
  - Set up MPD deamons
    - Para o sistema EM64T a variável PATH deve incluir
      - <installdir>/bin64 (/opt/intel/mpi/1.0.2/bin64) ✓
    - Criar na raiz da área de login o ficheiro .mpd.conf que contém a nossa MPD password
      - password=<nossa mpd password> (password=carloscampos)
    - Alterar as permissões do ficheiro .mpd.conf
      - Executar o comando chmod 600 .mpd.conf

Ambiente Unix (VIII)

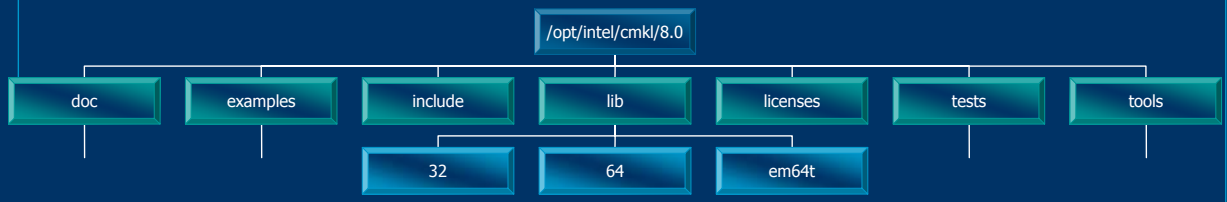
- Uso de Intel® MPI
  - Set up MPD deamons
    - Criar os "MPD deamons"
      - Executar o comando mpdboot
  - Outros comandos
    - Ver o status dos "MPD deamons"
      - Executar o comando mpdtrace
    - Terminar execução dos "MPD deamons"
      - Executar o comando mpdallexit

Acesso ao cluster SEARCH

www.di.uminho.pt/search
search.di.uminho.pt

Cluster SEARCH (I)

- Buscar informação
  - Executar o comando
    - rpm –qall | grep blas
- Instalação em /opt/intel/cmkl/8.0



/opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t

Intel® Extended Memory 64 Technology

Cluster SEARCH (II)

- Directoria /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t
  - libmkl_em64t.a : núcleos optimizados para Intel® EM64T
  - libmkl_lapack.a : rotinas de LAPACK
  - libmkl_scalapack.a : rotinas de ScaLAPACK
  - libmkl_blacs.a : rotinas de BLACS
  - libguide.a : "threading library for static linking"
  - ...
- Directoria /opt/intel/fce/9.0
  - "Intel® Fortran Compiler 9.0 for Linux"

Basic Linear Algebra Subprograms

BLAS

www.netlib.org/blas/index.html

BLAS: especificação (I)

- Conjunto de rotinas para realizar operações básicas com vectores e matrizes
- É uma especificação porque para cada rotina define a interface e a funcionalidade
- Existem versões optimizadas para diversas arquitecturas
  - Cada fabricante implementa a sua
- Serve de base para a construção de outras bibliotecas de Álgebra Linear Numérica

BLAS: especificação (II)

- Segundo o custo computacional, as rotinas de BLAS subdividem-se em 3 níveis
  - BLAS nível 1
    - Operações entre vectores
      - Realiza $\Theta(n)$ operações sobre $\Theta(n)$ dados
  - BLAS nível 2
    - Operações entre matrizes e vectores
      - Realiza $\Theta(n^2)$ operações sobre $\Theta(n^2)$ dados
  - BLAS nível 3
    - Operações entre matrizes
      - Realiza $\Theta(n^3)$ operações sobre $\Theta(n^2)$ dados

BLAS: nomenclatura (I)

- Tipo de dados
  - Prefixo (1 letra)

	Precisão Simples	Precisão Dupla
Reais	S	D
Complexos	C	Z

BLAS: nomenclatura (II)

- BLAS-1 : xYYYYY excepto IxAMAX
  - x : tipo de dados
  - YYYYY : tipo de operação

```
SUBROUTINE xROTG (                                      A, B, C, S )
SUBROUTINE xROTMG(                              D1, D2, A, B,       PARAM )
SUBROUTINE xROT  ( N,         X, INCX, Y, INCY,                 C, S )
SUBROUTINE xROTM ( N,         X, INCX, Y, INCY,                       PARAM )
SUBROUTINE xSWAP ( N,         X, INCX, Y, INCY )
SUBROUTINE xSCAL ( N,  ALPHA, X, INCX )
SUBROUTINE xCOPY ( N,         X, INCX, Y, INCY )
SUBROUTINE xAXPY ( N,  ALPHA, X, INCX, Y, INCY )
FUNCTION   xDOT  ( N,         X, INCX, Y, INCY )
FUNCTION   xDOTU ( N,         X, INCX, Y, INCY )
FUNCTION   xDOTC ( N,         X, INCX, Y, INCY )
FUNCTION   xxDOT ( N,         X, INCX, Y, INCY )
FUNCTION   xNRM2 ( N,         X, INCX )
FUNCTION   xASUM ( N,         X, INCX )
FUNCTION   IxAMAX( N,         X, INCX )
```

BLAS: nomenclatura (III)

- BLAS-2 e BLAS-3 : xYYZZZ
  - x : tipo de dados
    - S, D, C, Z
  - YY : tipo de matriz

	Geral	Simétrica/ Hermítica	Triangular
Densa	GE	SY/HE	TR
Banda	GB	SB/HB	TB

BLAS: nomenclatura (IV)

- BLAS-2 e BLAS-3 : xYYZZZ
  - ZZZ : tipo de operação
    - MV : produto Matriz-Vector
    - MM : produto Matriz-Matriz
    - SV : resolução de um sistema de equações lineares
    - SM : resolução de um sistema de equações lineares múltiplo
    - R : actualizações de dimensão 1
    - R2 : actualizações de dimensão 2
    - RK : actualizações de dimensão k
    - R2K : actualizações de dimensão 2k

BLAS: nomenclatura (V)

- BLAS-2 e BLAS-3 : xYYZZZ

```
xGEMV (        TRANS,      M, N,          ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xGBMV (        TRANS,      M, N, KL, KU, ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xHEMV ( UPLO,                 N,          ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xHBMV ( UPLO,                 N, K,       ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xHPMV ( UPLO,                 N,          ALPHA, AP,     X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xSYMV ( UPLO,                 N,          ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xSBMV ( UPLO,                 N, K,       ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xSPMV ( UPLO,                 N,          ALPHA, AP,     X, INCX, BETA,  Y, INCY )
xTRMV ( UPLO, TRANS, DIAG,    N,                 A, LDA, X, INCX )
xTBMV ( UPLO, TRANS, DIAG,    N, K,              A, LDA, X, INCX )
xTPMV ( UPLO, TRANS, DIAG,    N,                 AP,     X, INCX )
xTRSV ( UPLO, TRANS, DIAG,    N,                 A, LDA, X, INCX )
xTBSV ( UPLO, TRANS, DIAG,    N, K,              A, LDA, X, INCX )
xTPSV ( UPLO, TRANS, DIAG,    N,                 AP,     X, INCX )
        options               dim   scalar vector   vector   matrix
xGER  (                       M, N, ALPHA, X, INCX, Y, INCY, A, LDA )
xGERU (                       M, N, ALPHA, X, INCX, Y, INCY, A, LDA )
xGERC (                       M, N, ALPHA, X, INCX, Y, INCY, A, LDA )
xHER  ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX,          A, LDA )
xHPR  ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX,          AP )
xHER2 ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX, Y, INCY, A, LDA )
xHPR2 ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX, Y, INCY, AP )
xSYR  ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX,          A, LDA )
xSPR  ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX,          AP )
xSYR2 ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX, Y, INCY, A, LDA )
xSPR2 ( UPLO,                    N, ALPHA, X, INCX, Y, INCY, AP )
```


BLAS: nomenclatura (VI)

- BLAS-2 e BLAS-3 : xYYZZZ

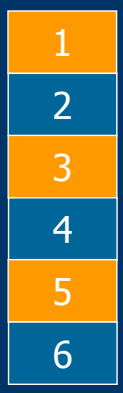
```
xGEMM (              TRANSA, TRANSB,      M, N, K, ALPHA, A, LDA, B, LDB, BETA,  C, LDC )
xSYMM ( SIDE, UPLO,                       M, N,    ALPHA, A, LDA, B, LDB, BETA,  C, LDC )
xHEMM ( SIDE, UPLO,                       M, N,    ALPHA, A, LDA, B, LDB, BETA,  C, LDC )
xSYRK (       UPLO, TRANS,                   N, K, ALPHA, A, LDA,          BETA,  C, LDC )
xHERK (       UPLO, TRANS,                   N, K, ALPHA, A, LDA,          BETA,  C, LDC )
xSYR2K(       UPLO, TRANS,                   N, K, ALPHA, A, LDA, B, LDB, BETA,  C, LDC )
xHER2K(       UPLO, TRANS,                   N, K, ALPHA, A, LDA, B, LDB, BETA,  C, LDC )
xTRMM ( SIDE, UPLO, TRANSA,        DIAG, M, N,    ALPHA, A, LDA, B, LDB )
xTRSM ( SIDE, UPLO, TRANSA,        DIAG, M, N,    ALPHA, A, LDA, B, LDB )
```

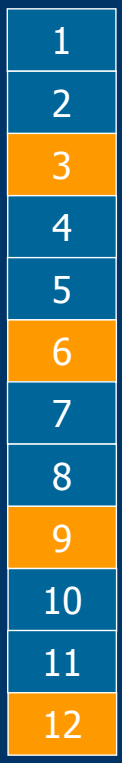
BLAS: vectores

- Definidos por 3 parâmetros
  - N : tamanho do vector
  - X : primeiro elemento do vector
  - INCX : distância entre os elementos

4, X(2), 1

3, X(1), 2

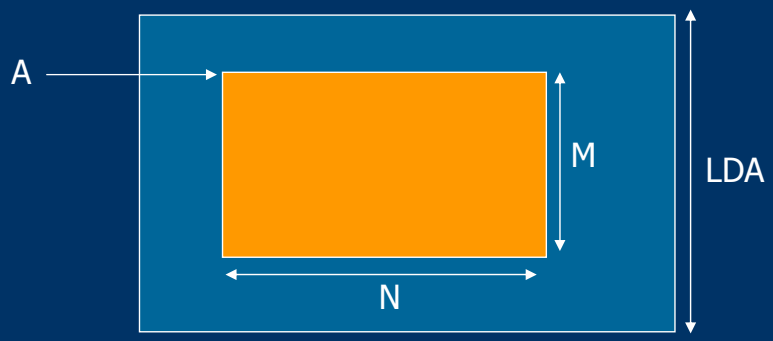




4, X(3), 3

BLAS: matrizes (I)

- Definidas por 4 parâmetros
  - M : número de linhas
  - N : número de colunas
  - A : primeiro elemento da matriz
  - LDA : distância entre os elementos de uma mesma linha ("Leading Dimension")



BLAS: matrizes (II)

- Definidas por 4 parâmetros

4, 2, A(3,1), 6

1,1	1,2	1,3
2,1	2,2	2,3
3,1	3,2	3,3
4,1	4,2	4,3
5,1	5,2	5,3
6,1	6,2	6,3

3, 2, A(3,2), 6

1,1	1,2	1,3
2,1	2,2	2,3
3,1	3,2	3,3
4,1	4,2	4,3
5,1	5,2	5,3
6,1	6,2	6,3

3, 3, A(1,1), 7

1,1	1,2	1,3
2,1	2,2	2,3
3,1	3,2	3,3
4,1	4,2	4,3
5,1	5,2	5,3
6,1	6,2	6,3

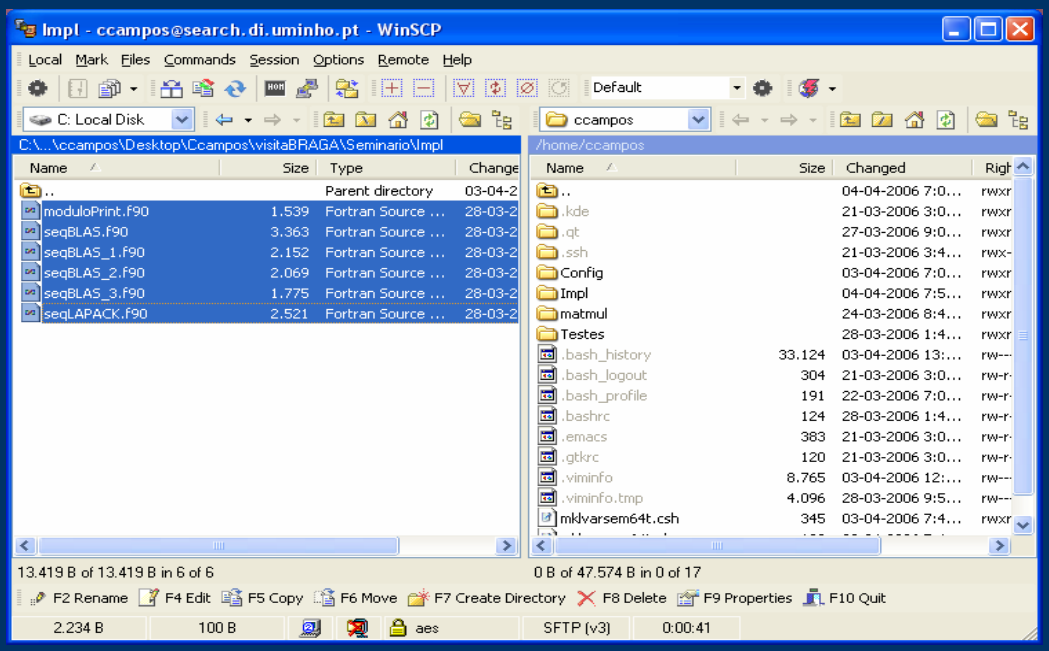
BLAS

Fortan 90

Experiências computacionais

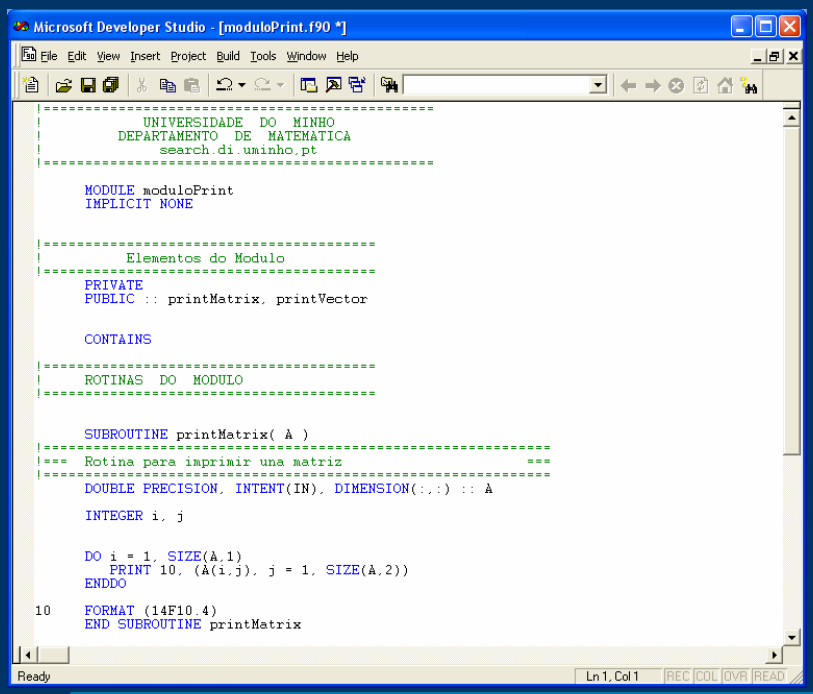
Fortran 90: WinSCP

- Ficheiros de trabalho



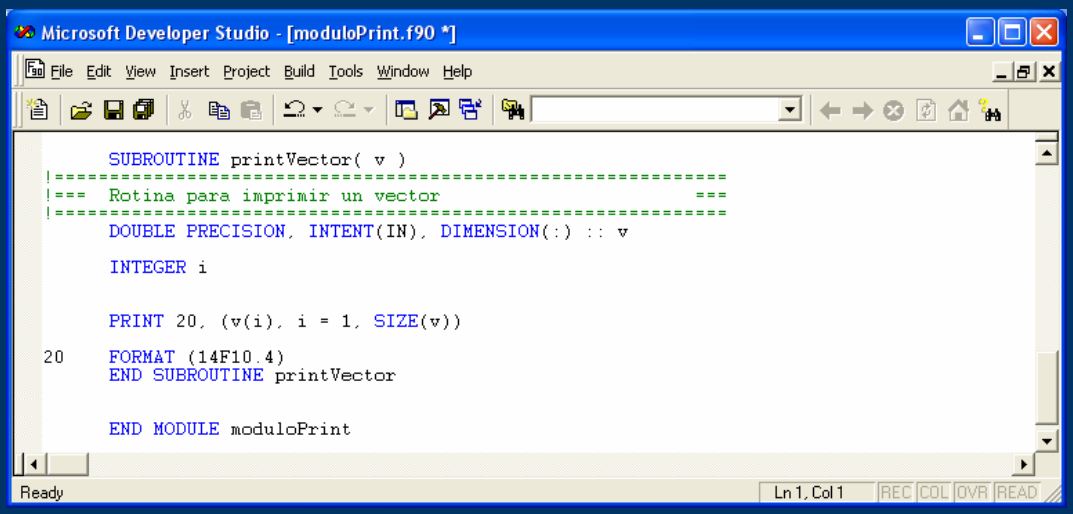
Fortran 90: módulos (I)

- Módulos auxiliares



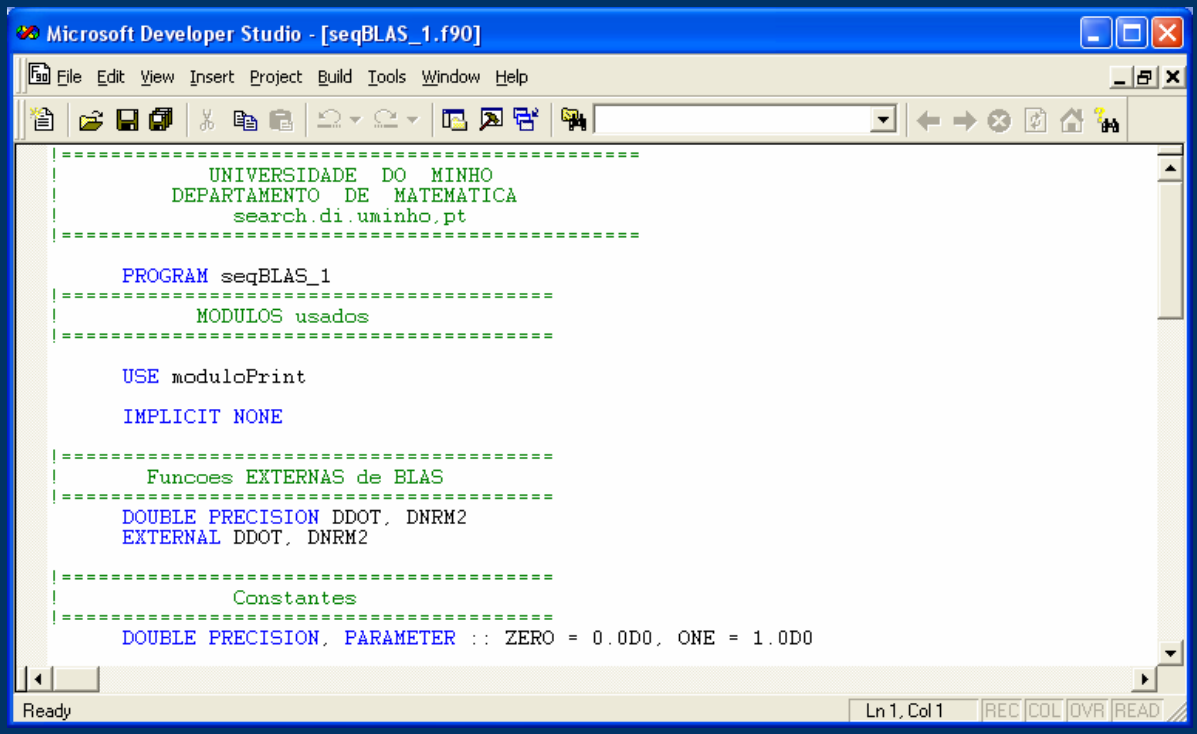
Fortran 90: módulos (II)

- Módulos auxiliares

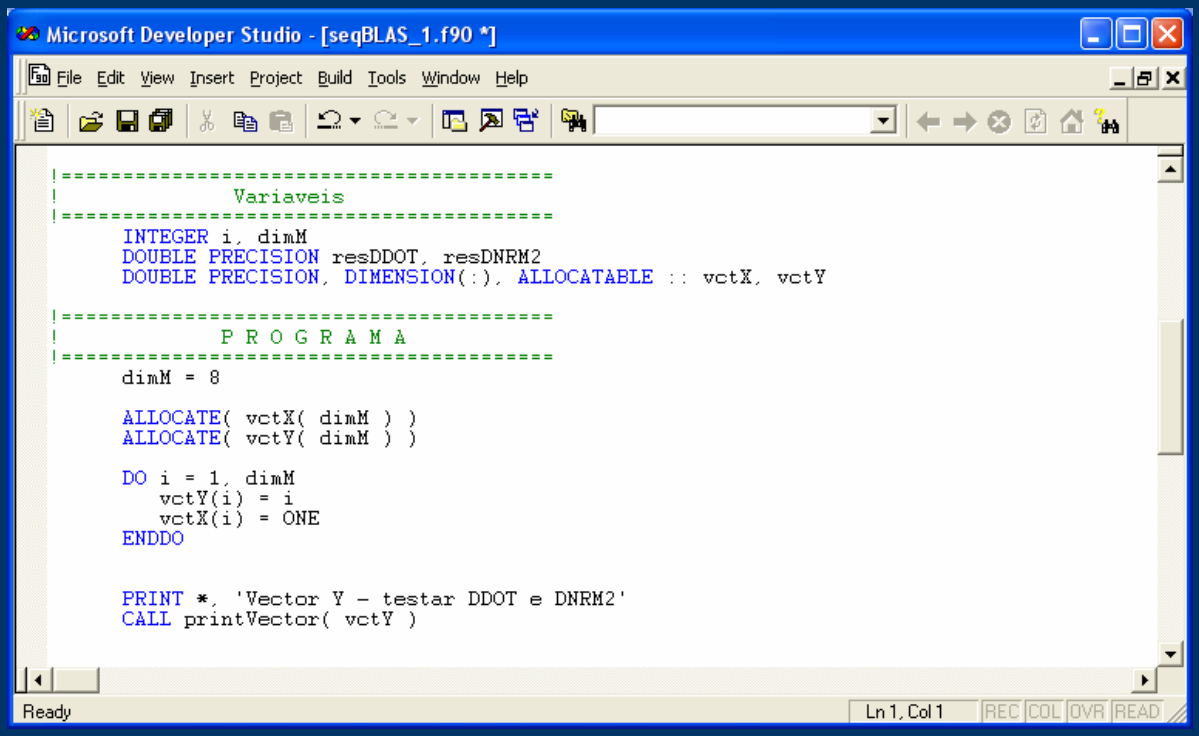


- Compilação
  - Executar o comando ifort –c nomeModulo.f90

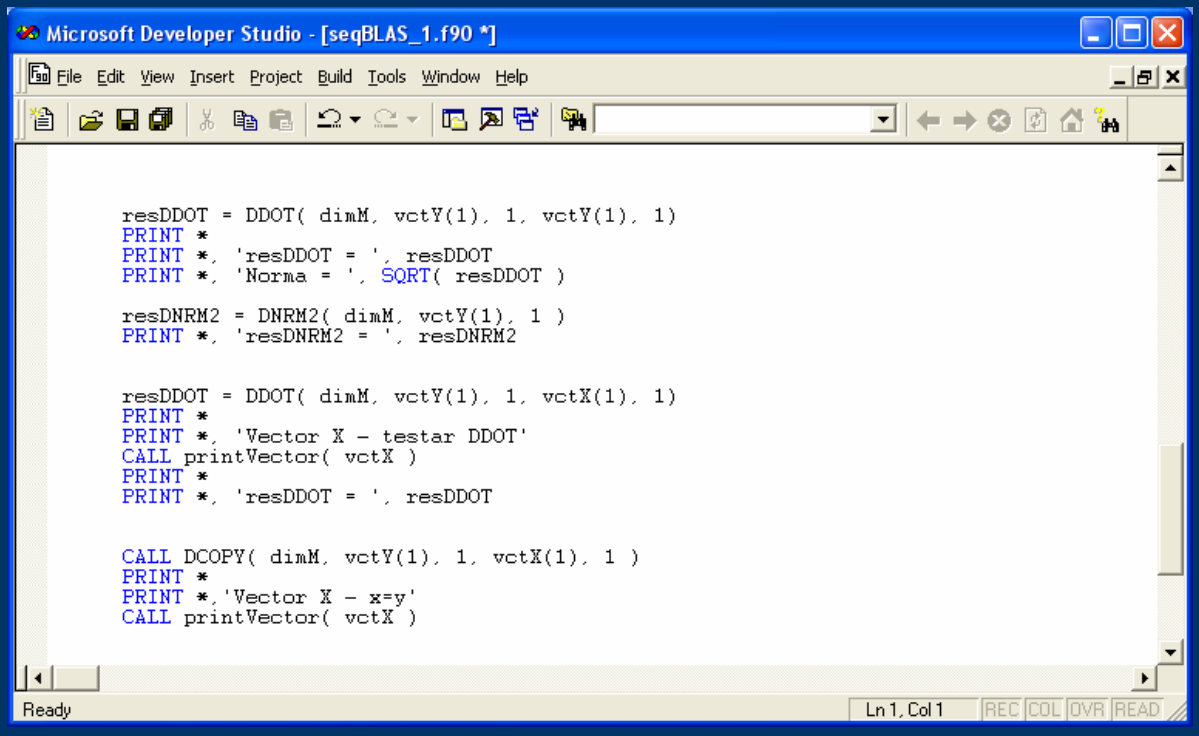
Fortran 90: programa principal (I)



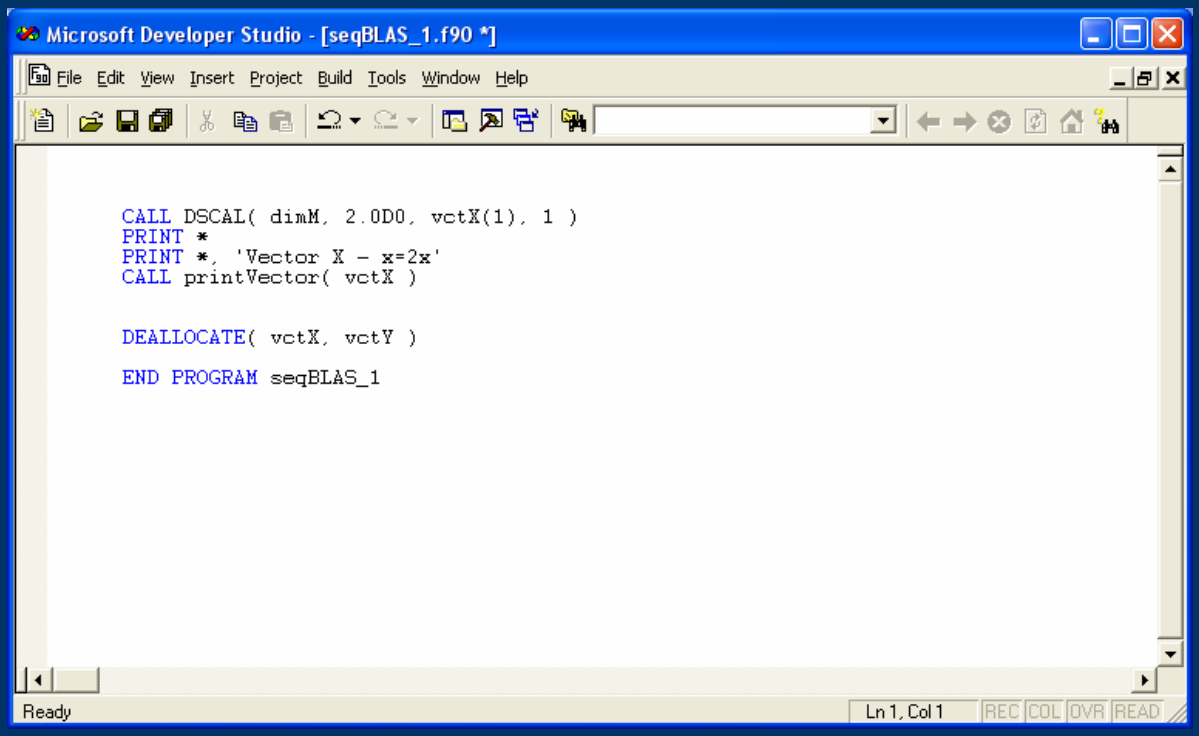
Fortran 90: programa principal (II)



Fortran 90: programa principal (III)



Fortran 90: programa principal (IV)



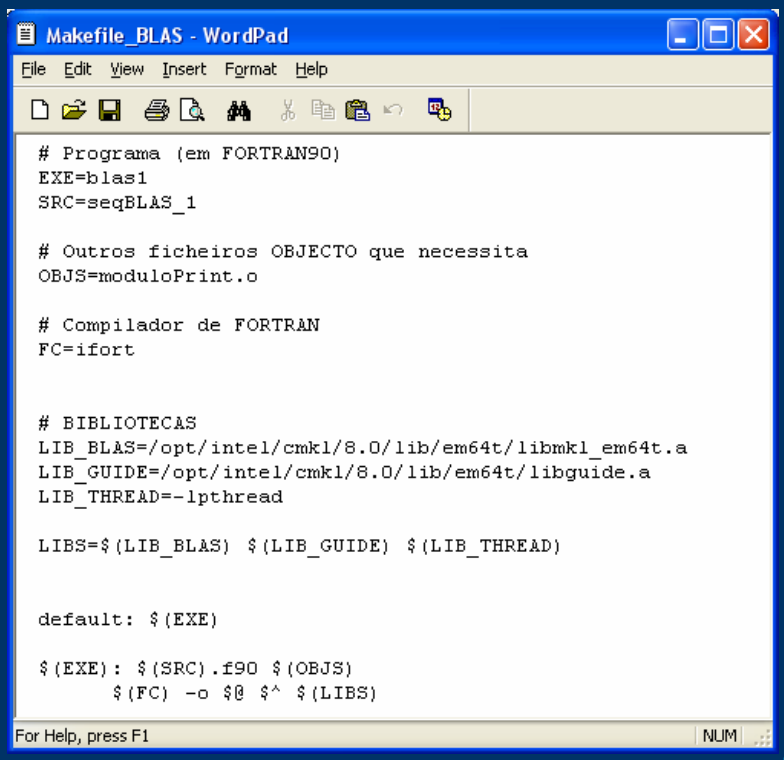
Fortran 90: compilação (I)

- Directiva de compilação
  - ifort –o nomeExecutável nomeProgramaPrincipal.f90 nomeModulo1.f90 nomeModulo2.f90 ...
    linkagem ao módulo de BLAS (libmkl_em64t.a)
    linkagem ao módulo estático (libguide.a)
    linkagem ao módulo de *threads* (/usr/lib64/libpthread.a)

    - ifort –o blas1 seqBLAS_1.f90 moduloPrint.f90 /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libmkl_em64t.a /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libguide.a -lpthread

Fortran 90: compilação (II)

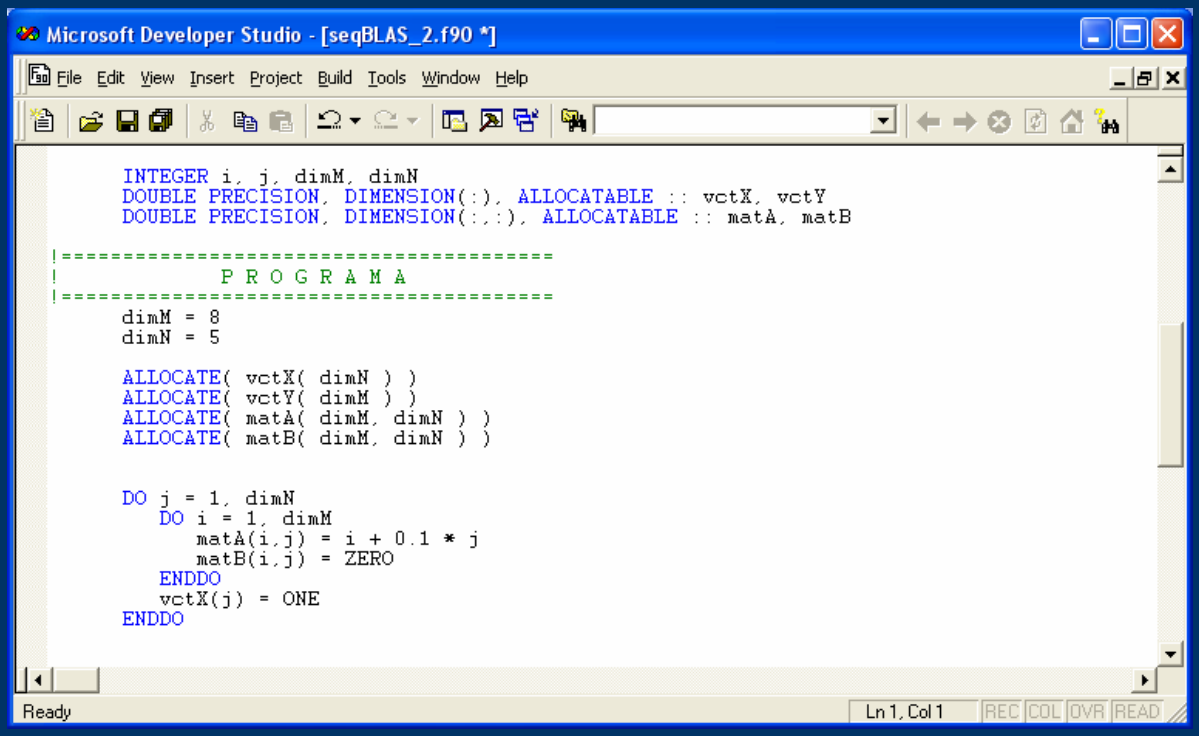
- Compilação
  - Fazer make



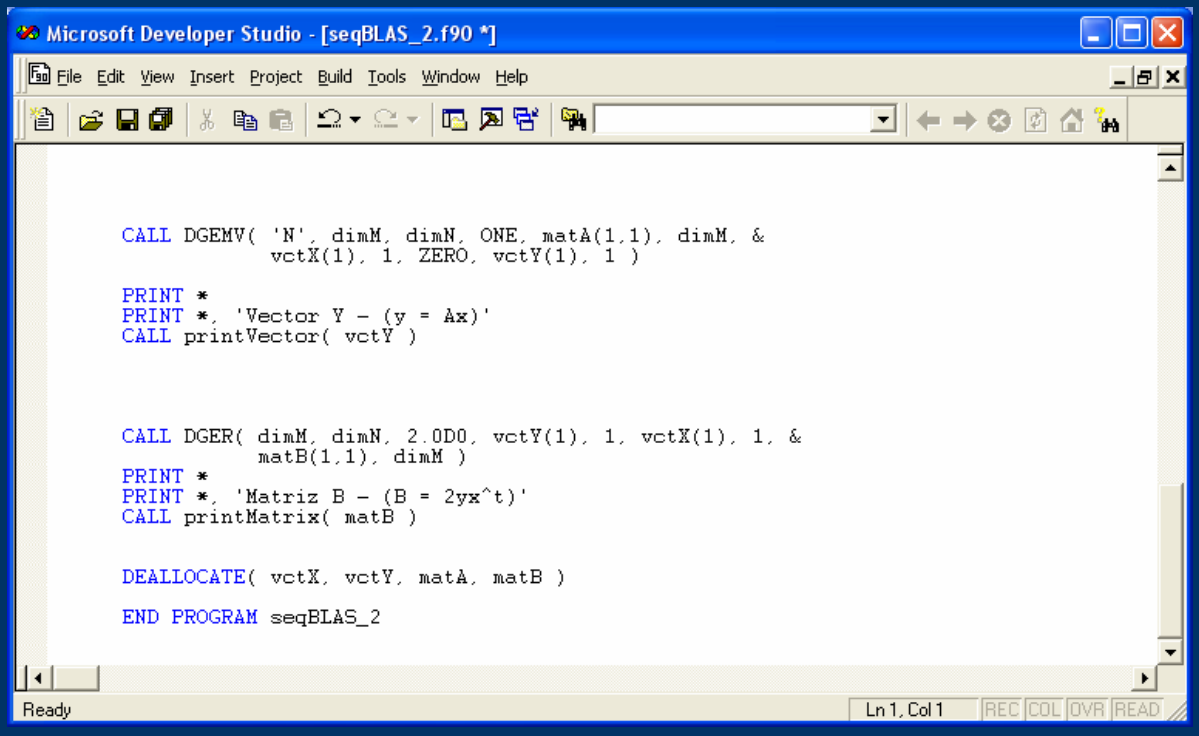
Fortran 90: execução

- Execução
  - Executar o comando ./nomeExecutável
    - ./blas1
- Exercícios
  - Dado o vector vctY
    - Cálcular a norma do vector 7*vctY
    - Cálcular o produto interno do vector que tem as componentes ímpares de vctY com o vector que tem as componentes pares de vctY

Fortran 90: programa principal (I)



Fortran 90: programa principal (II)



Fortran 90: compilação e execução (I)

- Compilação e execução
  - Ficheiro seqBLAS_2.f90
    - ./blas2

- Exercícios
  - Dados a matriz matA e o vector vctY
    - Cálcular a matriz

      $matA \leftarrow 4 * vctY * vctY^T + matA$
    - Com a matriz anterior, cálcular o vector

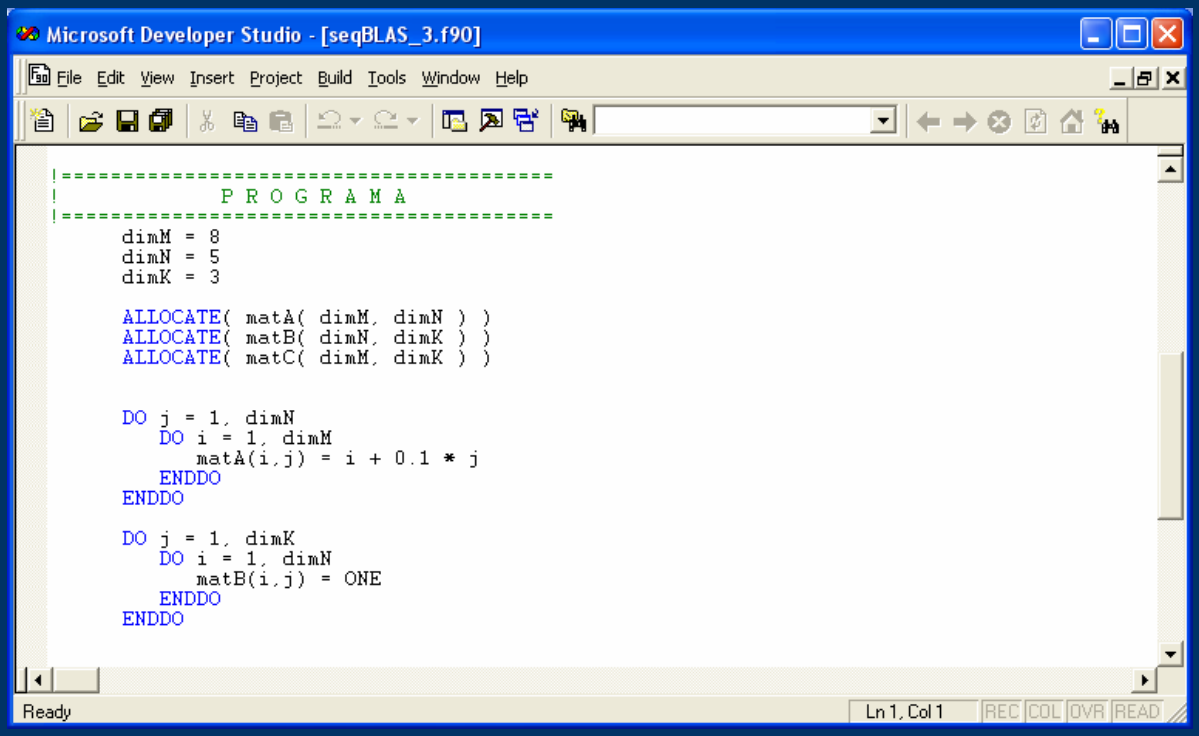
      $vctY \leftarrow 3 * matA * vctY$

Fortran 90: compilação e execução (II)

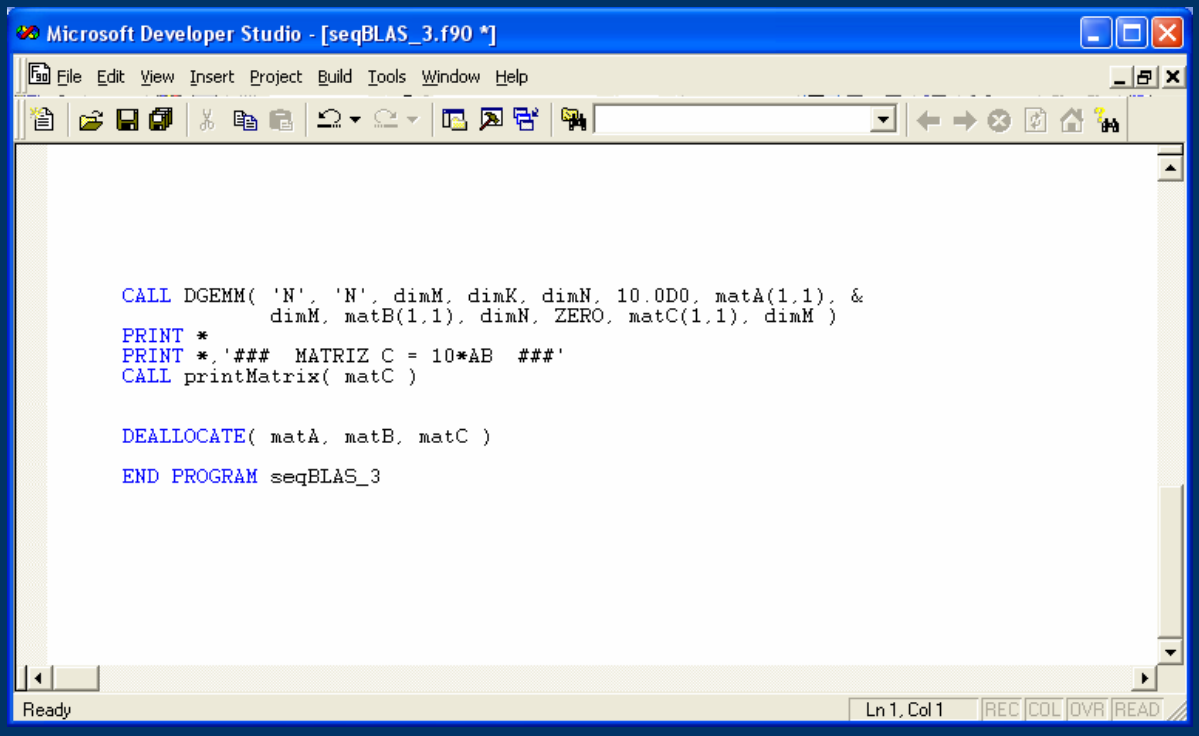
- Exercícios
  - $matA \leftarrow 4 * vctY * vctY^T + matA$
  - $vctY \leftarrow 3 * matA * vctY$

```
ccampos@search:~/Impl
[ccampos@search Impl]$ ./blas2exerc

 Matriz A - (A = 4yy^t + A)
    5.1000    9.2000   13.3000   17.4000   21.5000
   10.1000   18.2000   26.3000   34.4000   42.5000
   15.1000   27.2000   39.3000   51.4000   63.5000
   20.1000   36.2000   52.3000   68.4000   84.5000
   25.1000   45.2000   65.3000   85.4000  105.5000
    6.1000    6.2000    6.3000    6.4000    6.5000
    7.1000    7.2000    7.3000    7.4000    7.5000
    8.1000    8.2000    8.3000    8.4000    8.5000

 Vector Y - (y = 3Ay)
  721.5000 1426.5000 2131.5000 2836.5000 3541.5000  286.5000  331.5000  376.5000
[ccampos@search Impl]$
```

Fortran 90: programa principal (I)



Fortran 90: programa principal (II)



Linear Algebra PACKage

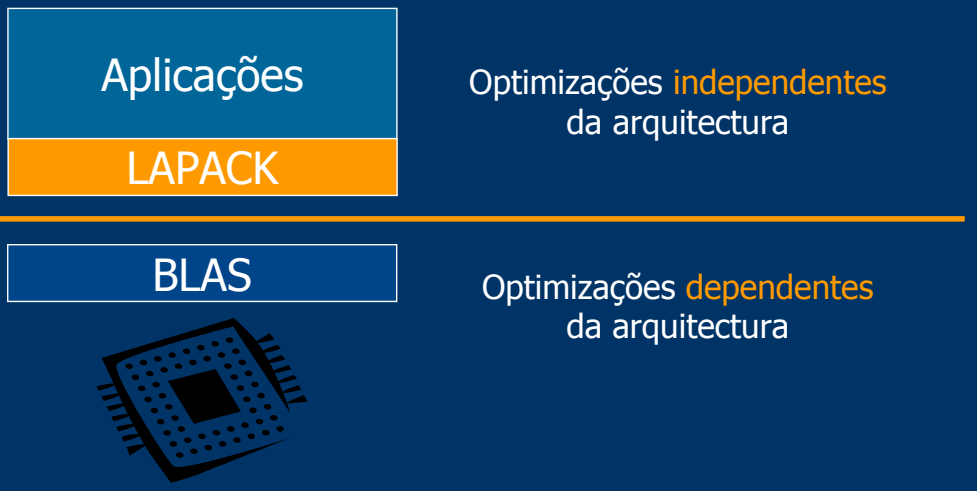
LAPACK User's Guide
www.netlib.org/lapack/lug/index.html

LAPACK: biblioteca (I)

- Biblioteca de algoritmos numéricos
- Conjunto de rotinas destinadas à resolução de problemas numéricos de Álgebra Linear
- Permite um alto rendimento e um código com um elevado grau de portabilidade
- Está desenhada para ser eficiente
  - Operações orientadas a blocos matriciais

LAPACK: biblioteca (II)

- As rotinas de LAPACK realizam a computação através das rotinas de BLAS
  - A eficiência de LAPACK depende da eficiência da BLAS



LAPACK: estrutura

- LAPACK está estruturada em 3 tipos de rotinas
  - Rotinas driver : para a resolução de problemas completos de Álgebra Linear
    - Resolução de um sistema de equações lineares
  - Rotinas computacionais : para a resolução de tarefas concretas de Álgebra Linear
    - Cálculo da decomposição LU de uma matriz
  - Rotinas auxiliares : para a realização de tarefas de menor complexidade
    - Cálculo da norma de uma matriz

LAPACK: funcionalidade

- LAPACK resolve numericamente problemas simples e generalizados de Álgebra Linear
  - Sistemas de equações lineares $AX = B$
  - Problemas lineares de mínimos quadrados $\min_x \|b - Ax\|_2$
  - Problemas de valores próprios $Av = \lambda v$
  - Problemas de valores singulares $A = U \sum V^t$
  - Outros
    - Decomposição de matrizes, cálculo de normas matriciais, ...

LAPACK: nomenclatura (I)

- Igual a BLAS-2 e a BLAS-3 : xYYZZZ
  - x : tipo de dados
    - S, D, C, Z
  - YY : tipo de matriz
    - BD : bidiagonal
    - GB : banda geral
    - GE : densa geral
    - GG : densa geral generalizada
    - GT : tridiagonal geral
    - HB : banda hermítica
    - HE : hermítica geral
    - HG : Hessenberg superior generalizada
    - HP : hermítica compactada
    - HS : Hessenberg superior
    - OP : ortogonal compactada
    - OR : ortogonal geral
    - PB : simétrica ou banda hermítica positiva definida

LAPACK: nomenclatura (II)

- Igual a BLAS-2 e a BLAS-3 : xYYZZZ
  - YY : tipo de matriz
    - PO : simétrica ou hermítica positiva definida
    - PP : simétrica ou hermítica positiva definida compactada
    - PT : simétrica ou tridiagonal hermítica positiva definida
    - SB : banda simétrica
    - SP : simétrica compactada
    - ST : tridiagonal simétrica
    - SY : simétrica geral
    - TB : banda triangular
    - TG : triangular generalizada
    - TP : triangular compactada
    - TR : triangular geral
    - TZ : trapezoidal geral
    - UN : unitária geral
    - UP : unitária compactada

LAPACK: nomenclatura (III)

- Igual a BLAS-2 e a BLAS-3 : xYYZZZ
  - ZZZ : tipo de operação
    - SV : resolução de sistemas de equações lineares
    - LS : resolução de mínimos quadrados
    - EV : resolução de valores próprios
    - EVD : resolução de valores próprios com o método divide-e-vencerás
    - ES : resolução de valores próprios (factorização de Schur)
    - SVD : resolução da decomposição em valores singulares
    - ESX : resolução de valores próprios generalizados não simétricos com a factorização de Schur
    - ...

LAPACK: gestão de erros (I)

- O controlo dos erros das rotinas da LAPACK é realizado pela rotina XERBLA
- LAPACK realiza a comprovação dos parâmetros

```
SUBROUTINE DGESV( N, NRHS, A, LDA, IPIV, B, LDB, INFO )
…
INFO = 0
IF( N.LT.0 ) THEN
   INFO = -1
ELSE IF( NRHS.LT.0 ) THEN
   INFO = -2
ELSE IF( LDA.LT.MAX( 1, N ) ) THEN
   INFO = -4
ELSE IF( LDB.LT.MAX( 1, N ) ) THEN
   INFO = -7
END IF
IF( INFO.NE.0 ) THEN
   CALL XERBLA( 'DGESV ', -INFO )
   RETURN
END IF
…
```


LAPACK: gestão de erros (II)

- LAPACK devolve os erros dos parâmetros

```
SUBROUTINE DGESV( N, NRHS, A, LDA, IPIV, B, LDB, INFO )
…
*
*  INFO    (output) INTEGER
*          = 0:  successful exit
*          < 0:  if INFO = -i, the i-th argument had an illegal value
*          > 0:  if INFO = i, U(i,i) is exactly zero.  The factorization
*                has been completed, but the factor U is exactly
*                singular, so the solution could not be computed.
*
…
```

- Conselho
  - Durante a fase de implementação deve-se usar esta funcionalidade da LAPACK

LAPACK: espaço de trabalho (I)

- Algumas rotinas de LAPACK necessitam de um espaço de trabalho adicional para obter melhores prestações

```
      SUBROUTINE DGEQRF( M, N, A, LDA, TAU, WORK, LWORK, INFO )
…
*  WORK    (workspace/output) DOUBLE PRECISION array, dimension (LWORK)
*          On exit, if INFO = 0, WORK(1) returns the optimal LWORK.
*
*  LWORK   (input) INTEGER
*          The dimension of the array WORK.  LWORK >= max(1,N).
*          For optimum performance LWORK >= N*NB, where NB is
*          the optimal blocksize.
…

      SUBROUTINE DGESVD( JOBU, JOBVT, M, N, A, LDA, S, U, LDU, VT, LDVT,
     $                   WORK, LWORK, INFO )
…
*  LWORK   (input) INTEGER
*          The dimension of the array WORK. LWORK >= 1.
*          LWORK >= MAX(3*MIN(M,N)+MAX(M,N),5*MIN(M,N)-4).
*          For good performance, LWORK should generally be larger.
…
```


LAPACK: espaço de trabalho (II)

- As rotinas de LAPACK informam sobre a dimensão do espaço de trabalho óptimo

```
      SUBROUTINE DGESVD( JOBU, JOBVT, M, N, A, LDA, S, U, LDU, VT, LDVT,
     $                   WORK, LWORK, INFO )
…
*  WORK    (workspace/output) DOUBLE PRECISION array, dimension (LWORK)
*          On exit, if INFO = 0, WORK(1) returns the optimal LWORK;
*          if INFO > 0, WORK(2:MIN(M,N)) contains the unconverged
*          superdiagonal elements of an upper bidiagonal matrix B
*          whose diagonal is in S (not necessarily sorted). B
*          satisfies A = U * B * VT, so it has the same singular values
*          as A, and singular vectors related by U and VT.
*
*  LWORK   (input) INTEGER
…
*          If LWORK = -1, then a workspace query is assumed; the routine
*          only calculates the optimal size of the WORK array, returns
*          this value as the first entry of the WORK array, and no error
*          message related to LWORK is issued by XERBLA.
…
```

LAPACK: optimização (I)

- A ÚNICA optimização possível em LAPACK consiste em afinar o tamanho do bloco óptimo
- O tamanho do bloco usado numa rotina depende da rotina ILAENV

```
      SUBROUTINE DGEBRD( M, N, A, LDA, D, E, TAUQ, TAUP, WORK, LWORK,
     $                   INFO )
…
      NB = MAX( 1, ILAENV( 1, 'DGEBRD', ' ', M, N, -1, -1 ) )
…
*        Set the crossover point NX.
*
         NX = MAX( NB, ILAENV( 3, 'DGEBRD', ' ', M, N, -1, -1 ) )
*
*        Determine when to switch from blocked to unblocked code.
*
…
```


LAPACK: optimização (II)

- ILAENV é definido durante a fase de instalação de LAPACK
  - Pode não ser o tamanho óptimo

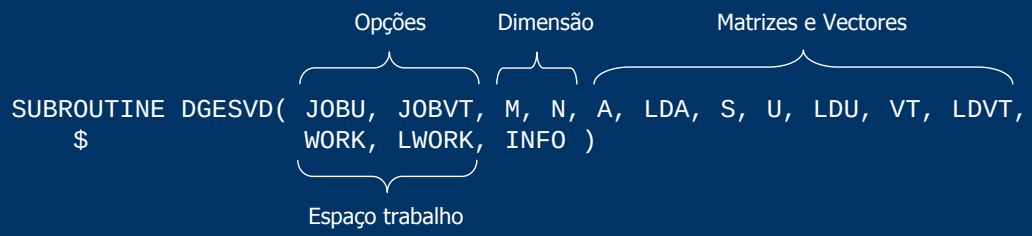
```
      FUNCTION ILAENV( ISPEC, NAME, OPTS, N1, N2, N3,
     $                 N4 )
…
      IF( C2.EQ.'GE' ) THEN
         IF( C3.EQ.'TRF' ) THEN
            IF( SNAME ) THEN
               NB = 64
            ELSE
               NB = 64
            END IF
…
         ELSE IF( C3.EQ.'BRD' ) THEN
            IF( SNAME ) THEN
               NB = 32
            ELSE
               NB = 32
            END IF
…
```

LAPACK: optimização (III)

- Cálculo do tamanho do bloco óptimo a ser usado
  - Começa por definir o tamanho do bloco óptimo invocando a rotina ILAENV
  - Se o valor de LWORK é suficientemente grande, então a rotina usa o tamanho do bloco calculado antes
  - Caso contrário, a rotina calcula o maior tamanho do bloco possível para o valor de LWORK
  - Se o novo valor calculado não é menor que o valor definido por ILAENV, então este é o tamanho do bloco
  - Se não, a rotina usa um algoritmo não orientado a blocos matriciais

LAPACK: parâmetros

- Os parâmetros das rotinas de LAPACK estão estruturados em 5 grupos
  - Opções da rotina
  - Dimensão do problema
  - Definição das matrizes e vectores
  - Espaço de trabalho
  - Parâmetro INFO

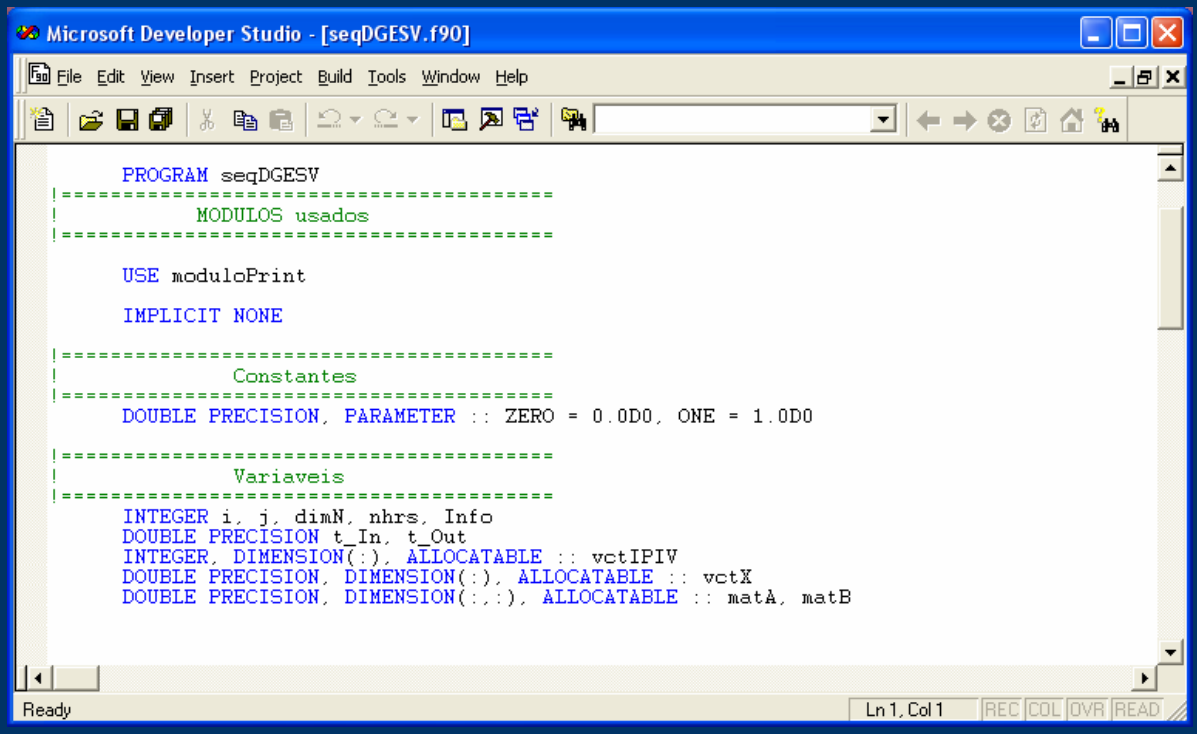


LAPACK

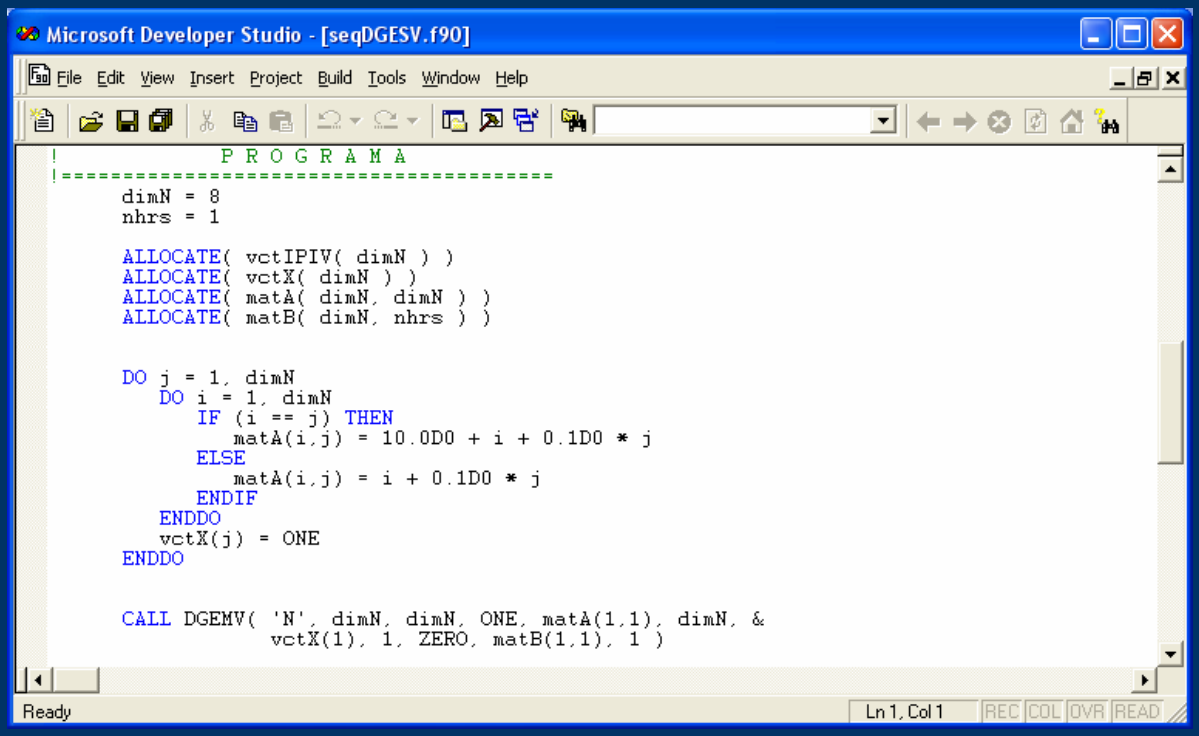
Fortran 90

Experiências computacionais

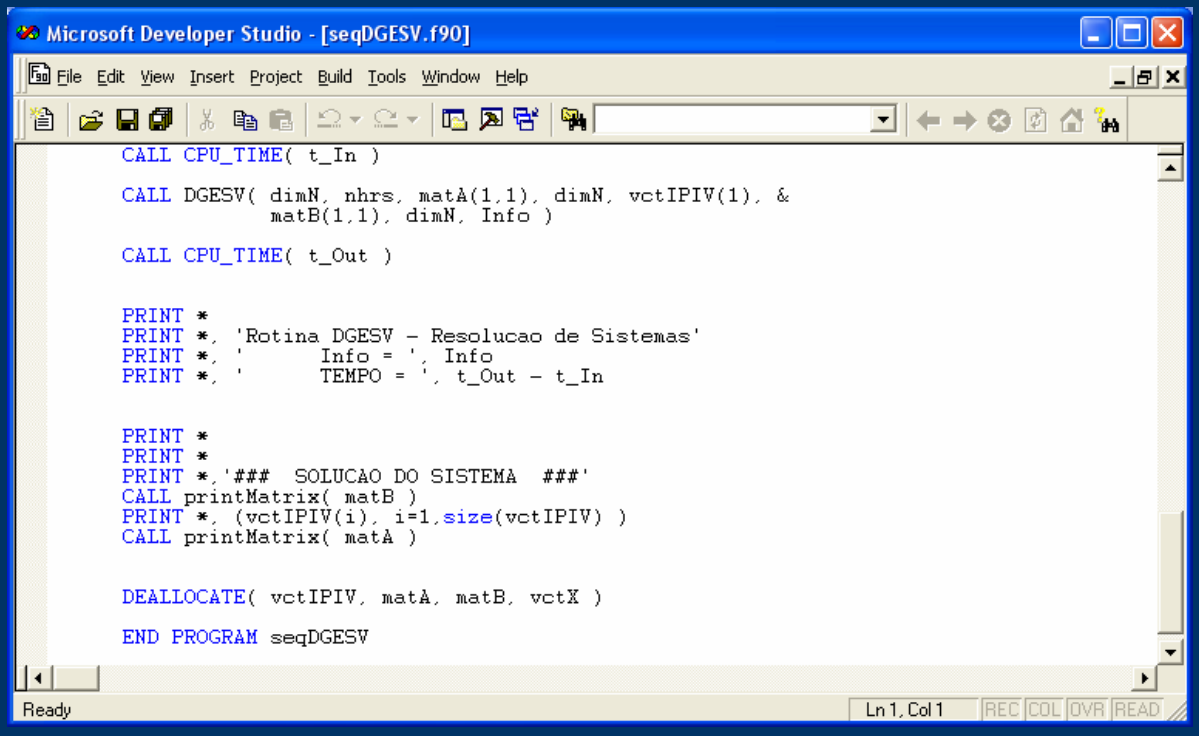
Fortran 90: programa principal (I)



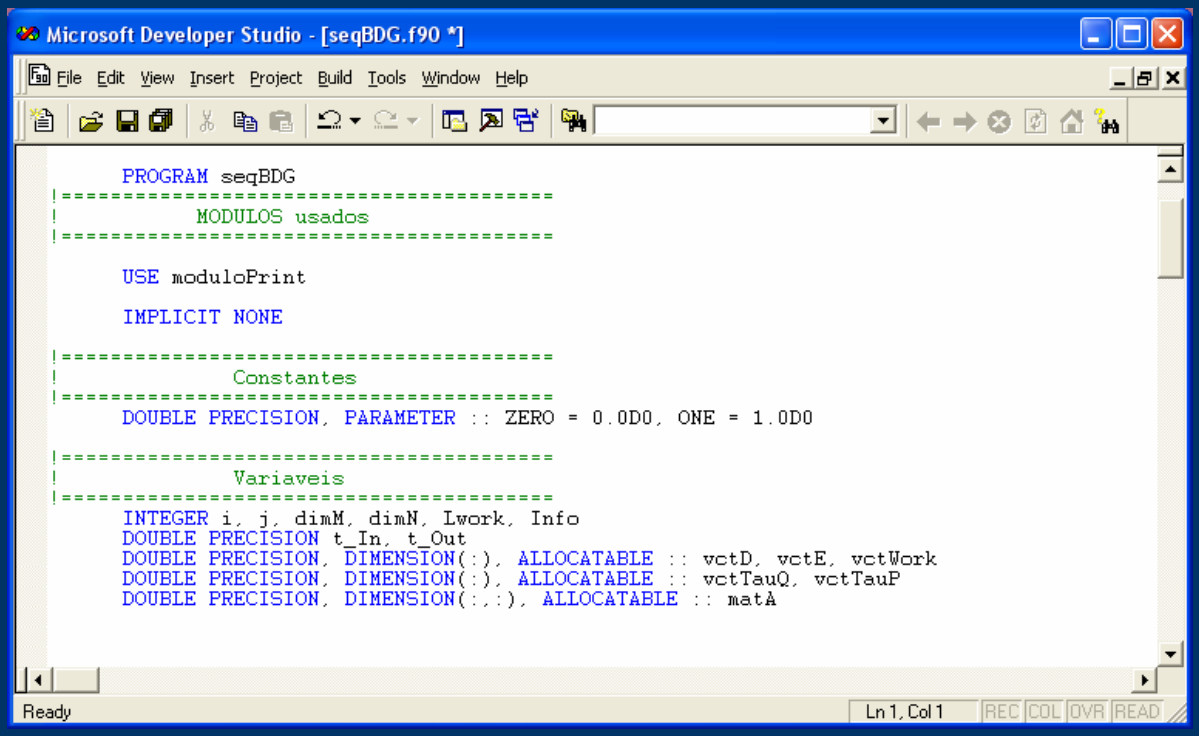
Fortran 90: programa principal (II)



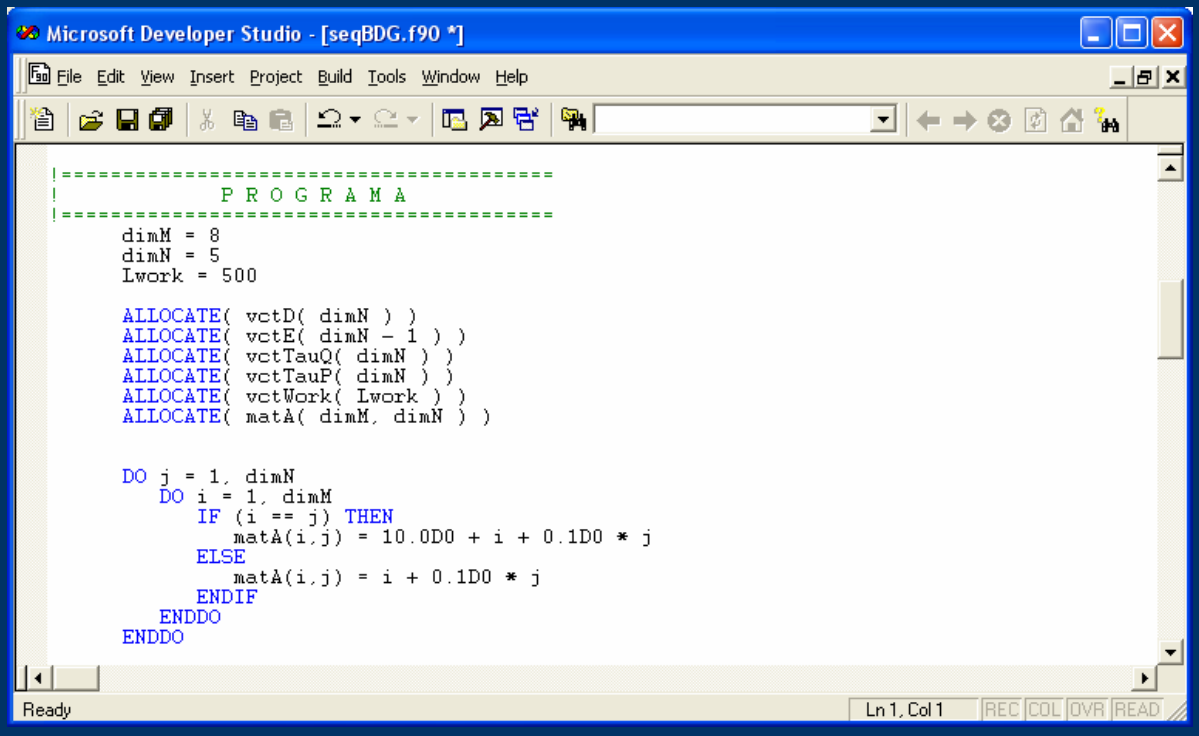
Fortran 90: programa principal (III)



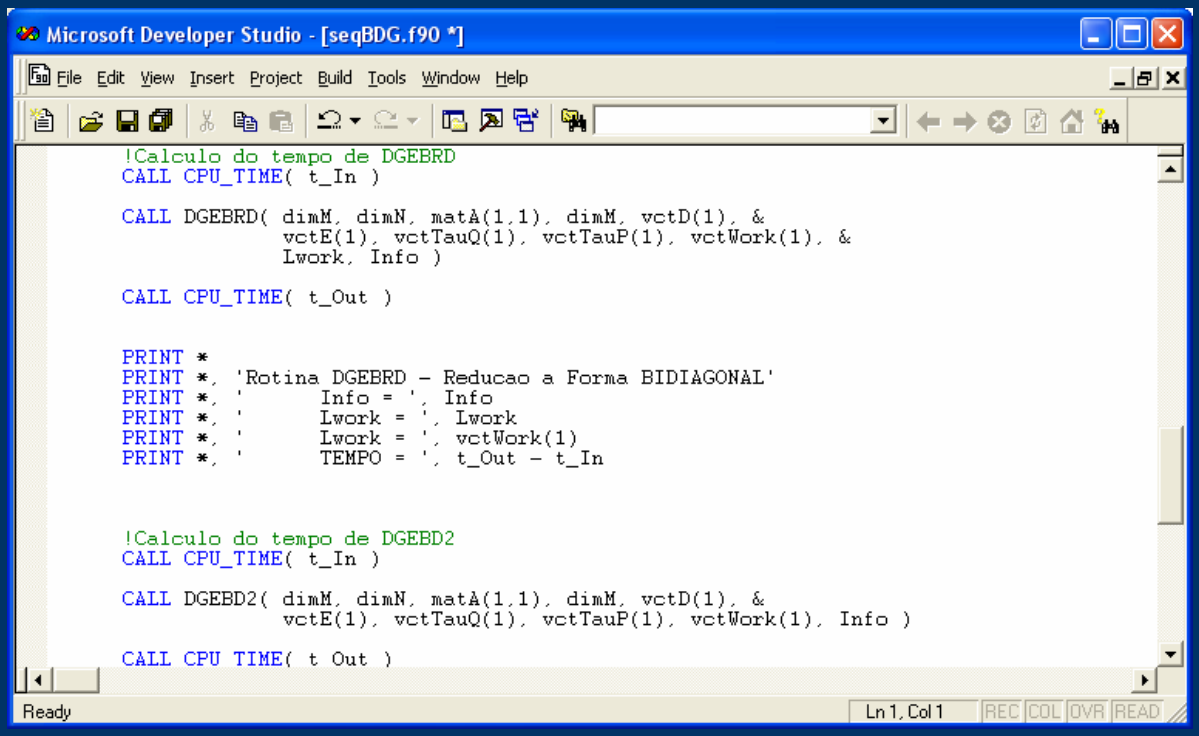
Fortran 90: programa principal (IV)



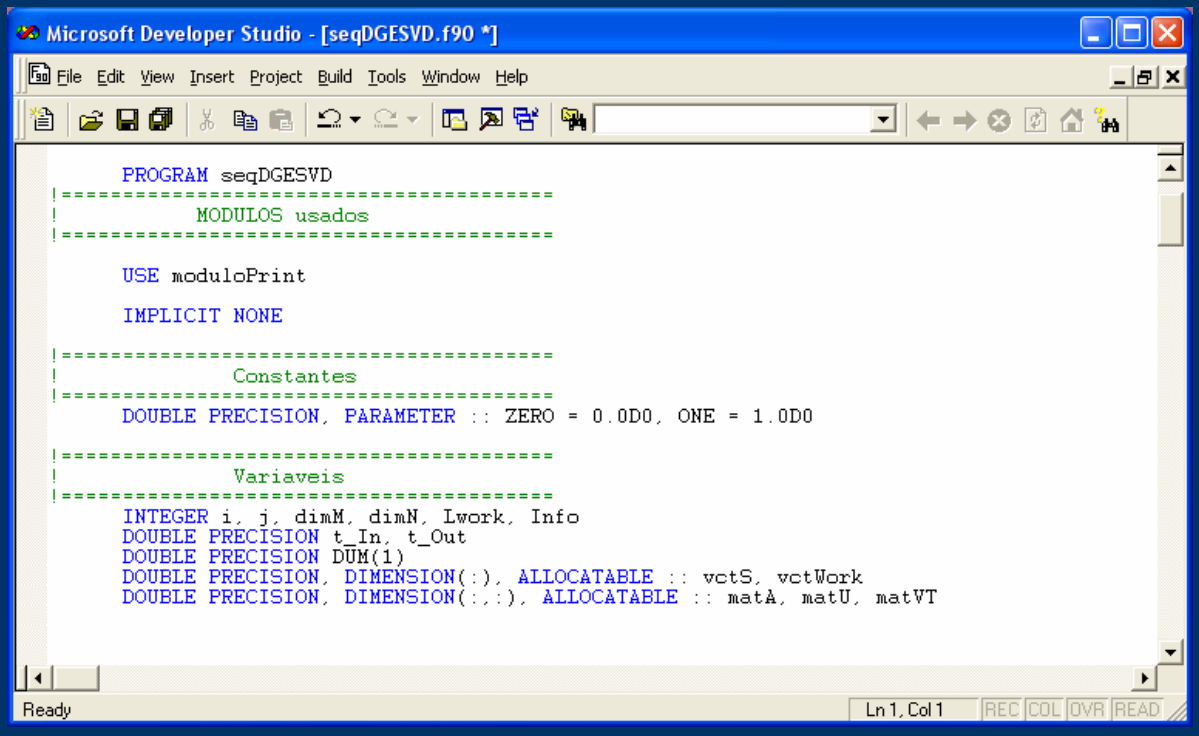
Fortran 90: programa principal (V)



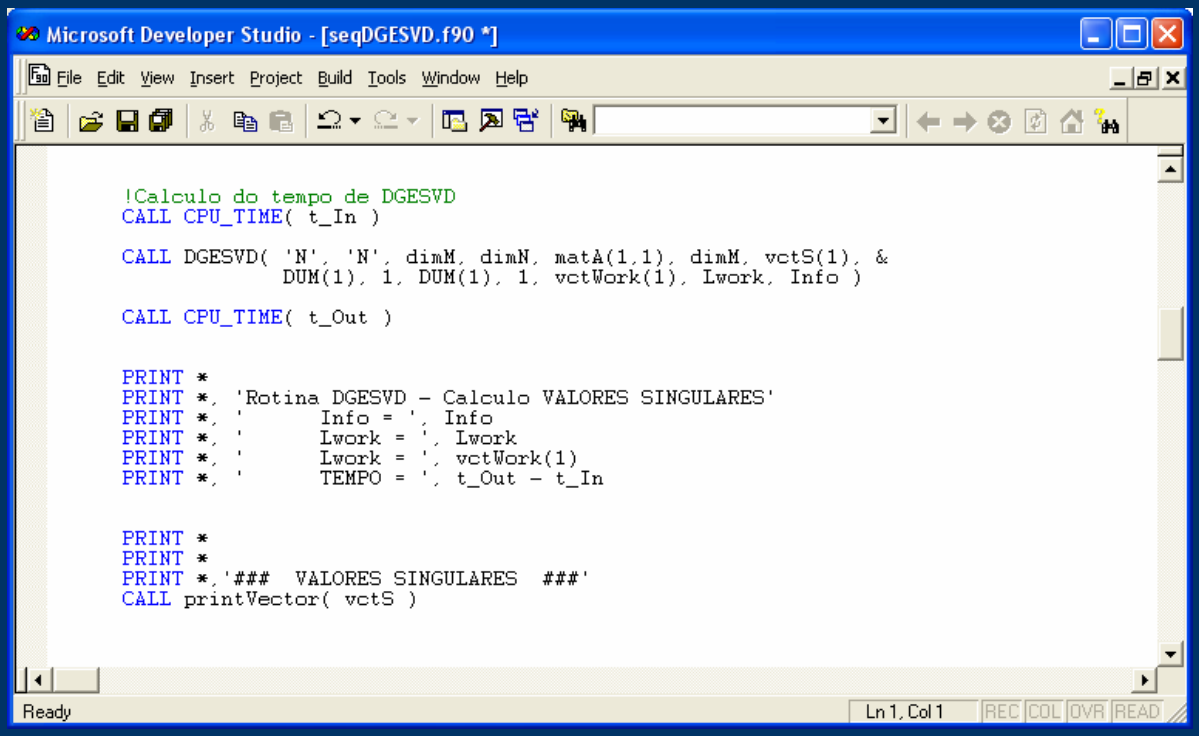
Fortran 90: programa principal (VI)



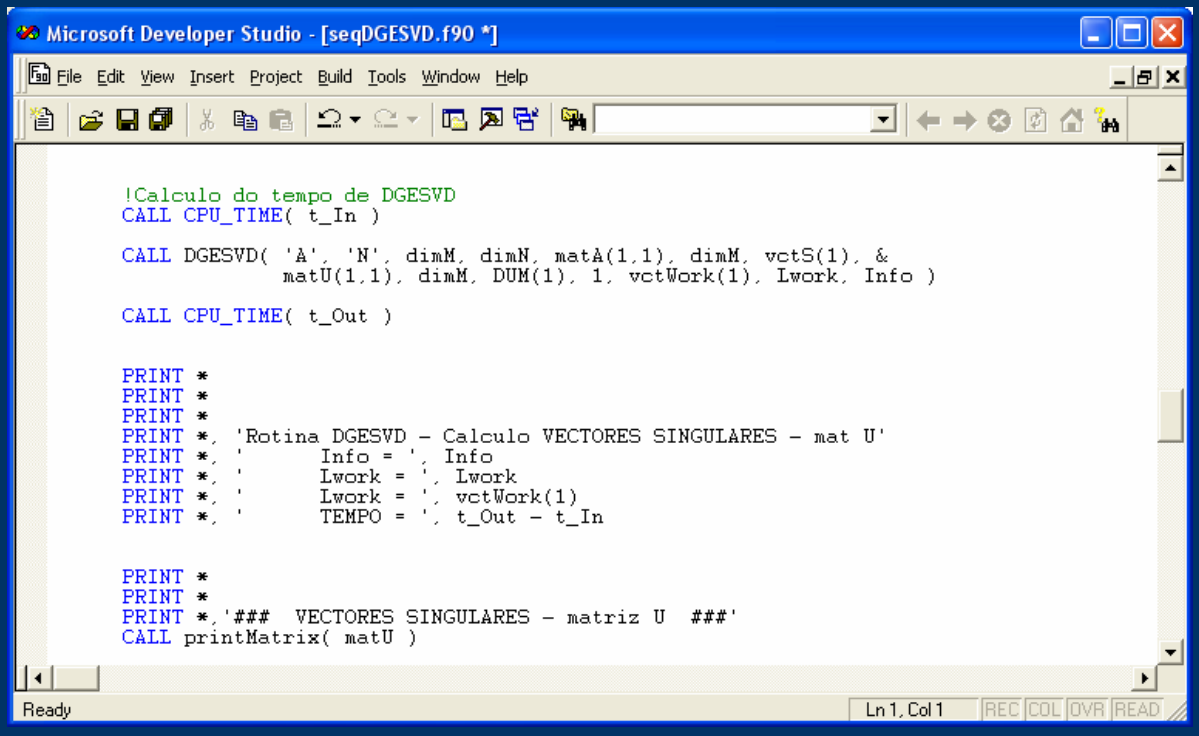
Fortran 90: programa principal (VII)



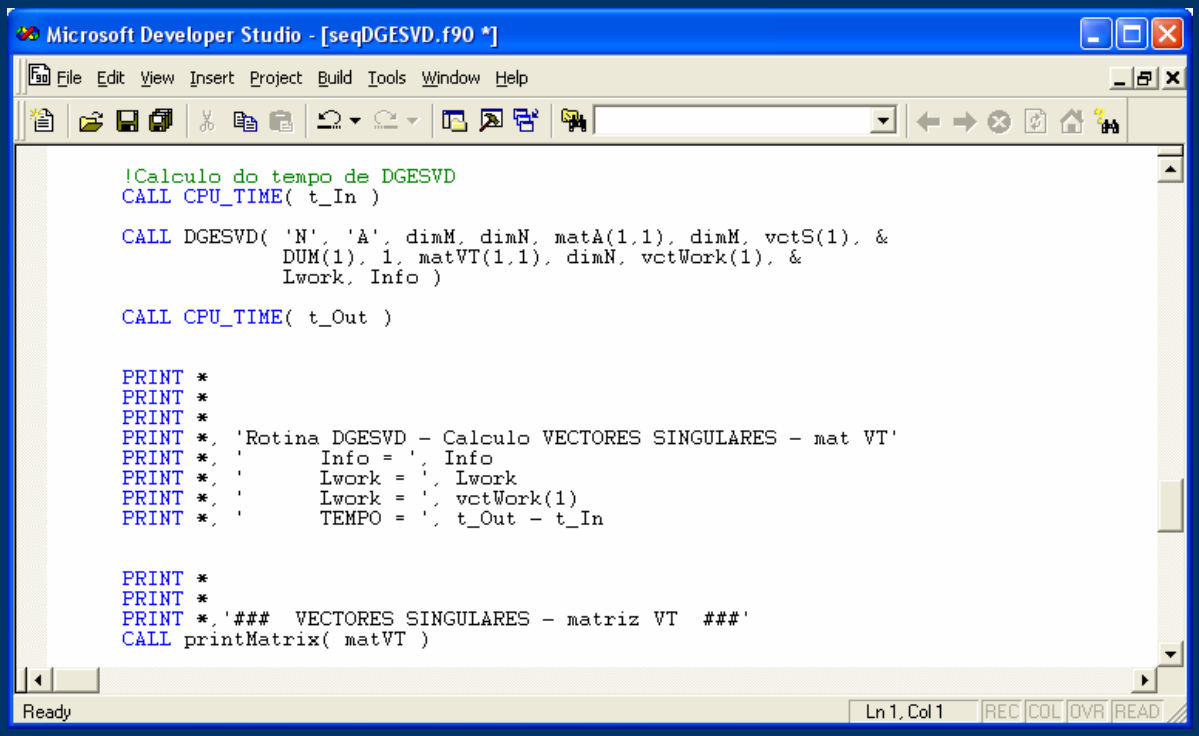
Fortran 90: programa principal (VIII)



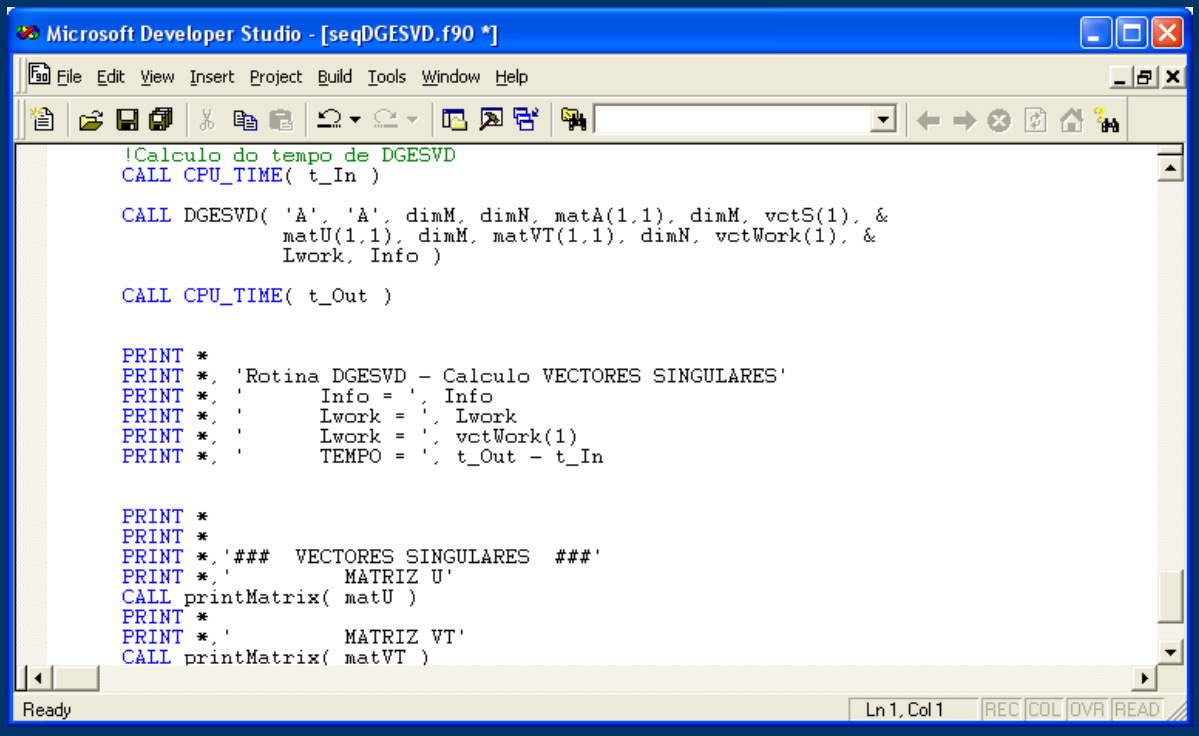
Fortran 90: programa principal (IX)



Fortran 90: programa principal (X)



Fortran 90: programa principal (XI)



Fortran 90: compilação (I)

- Directiva de compilação
  - ifort –o nomeExecutável nomeProgramaPrincipal.f90 nomeModulo1.f90 nomeModulo2.f90 ...

  linkagem ao módulo de LAPACK (libmkl_lapack.a)

  linkagem ao módulo de BLAS (libmkl_em64t.a)

  linkagem ao módulo estático (libguide.a)

  linkagem ao módulo de *threads* (-lpthread)

    - ifort –o lapack seqDGESVD.f90 moduloPrint.f90 /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libmkl_lapack.a /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libmkl_em64t.a /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libguide.a -lpthread

Fortran 90: compilação (II)

- Compilação
  - Fazer make

Makefile_LAPACK - WordPad

File Edit View Insert Format Help

```
# Programa (em FORTRAN90)
EXE=lapack
SRC=seqDGESVD

# Outros ficheiros OBJECTO que necessita
OBJS=moduloPrint.o

# Compilador de FORTRAN
FC=ifort

# BIBLIOTECAS
LIB_LAPACK=/opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libmkl_lapack.a
LIB_BLAS=/opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libmkl_em64t.a
LIB_GUIDE=/opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libguide.a
LIB_THREAD=-lpthread

LIBS=$(LIB_LAPACK) $(LIB_BLAS) $(LIB_GUIDE) $(LIB_THREAD)

default: $(EXE)

$(EXE): $(SRC).f90 $(OBJS)
        $(FC) -o $@ $^ $(LIBS)
```

For Help, press F1

LAPACK

Portable Batch System
Experiências computacionais

PBS: conceitos gerais

- Para o processamento massivo os trabalhos devem ser submetidos ao sistema de gestão de filas
  - Comandos do Torque (baseado no PBS)
  - Comandos do escalonador Maui
- O sistema controla a gestão da lista de trabalhos consoante os recursos disponíveis e de acordo com as políticas definidas e implementadas
  - Maximizar a eficiência da utilização do cluster
  - Justiça no acesso aos recursos

PBS: criação de *scripts* (I)

- Antes de submeter um trabalho para execução deverá criar um *script* com as directivas PBS
  - Número de nós a usar : -l nodes = #
    - Usar os 2 processadores do nó : -l nodes = # : ppn = 2
  - Tempo máximo de execução : -l walltime = hh:mm:ss
  - Número de CPUS a usar : -l ncpus = #
  - Máxima memória requerida : -l mem = #kb/mb/gb
  - ...
- Para obter mais informação
  - Executar o comando man pbs

PBS: criação de *scripts* (II)

- Algums exemplos de *scripts*

exemplo - Notepad

File Edit Format View Help

```
#!/bin/sh
#PBS -l nodes=1
#PBS -l walltime=05:00
echo "ola mundo!"
sleep 60
```

lapack - Notepad

File Edit Format View Help

```
#!/bin/sh
#PBS -l nodes=1
#PBS -l walltime=30:00
/home/ccampos/workshopSEARCH/Exe/lapack
```

PBS: submeter o trabalho

- Após a criação do *script* poderá submetê-lo para execução pelo sistema de gestão de filas através do comando qsub, utilizando o nome do *script* como parâmetro
  - Executar o comando qsub nomedoscript
    - qsub exemplo.scr
    - qsub lapack.scr
- Se o trabalho foi correctamente processado o identificador do novo trabalho será apresentado como resposta do comando
    - Exemplo : 6990.search.di.uminho.pt

PBS: apresentação dos resultados

- Quando o trabalho terminar a directoria onde foi submetido conterá dois ficheiros adicionais
  - Um contendo as mensagens de erro (stderr)
    - exemplo.scr.e6990
    - lapack.scr.e6990
  - Outro contendo a saída para a consola (stdout)
    - exemplo.scr.o6990
    - lapack.scr.o6990
- Usando o comando cat poderá ver o conteúdo de cada um dos ficheiros

PBS: alguns comandos úteis (I)

- Comandos do Torque
  - qsub : submeter trabalhos para execução
    - qsub exemplo.scr
  - qdel : apagar/remover o trabalho em execução
    - qdel 6990
  - qstat : devolve a lista dos trabalhos submetidos para execução
    - qstat -a : lista todos os trabalhos do sistema de gestão
    - qstat -r : lista todos os trabalhos em execução
    - qstat -s : lista todos os trabalhos com comentários de estado
    - qstat -q : lista todas as *queues* do sistema

PBS: alguns comandos úteis (II)

- Comandos do escalonador Maui
  - showq : lista todos os trabalhos em execução, parados e bloqueados
  - showbf : lista todos os recursos que actualmente estão disponíveis
  - checkjob : lista informação sobre os trabalhos
    - checkjob 6990
  - showstart : lista o momento em que o trabalho poderá começar a ser executado
    - showstart 6990
  - showres : lista a informação de reserva do trabalho

Scalable Linear Algebra PACKage

ScaLAPACK User's Guide
www.netlib.org/scalapack/slug/index.html

ScaLAPACK: biblioteca (I)

- Biblioteca de rotinas para resolver numericamente problemas de Álgebra Linear em arquitecturas MIMD de memória distribuida e com mecanismos de comunicação
- Objectivos
  - Eficiência
  - Escalabilidade
  - Portabilidade
  - Flexibilidade
  - Facilidade de utilização

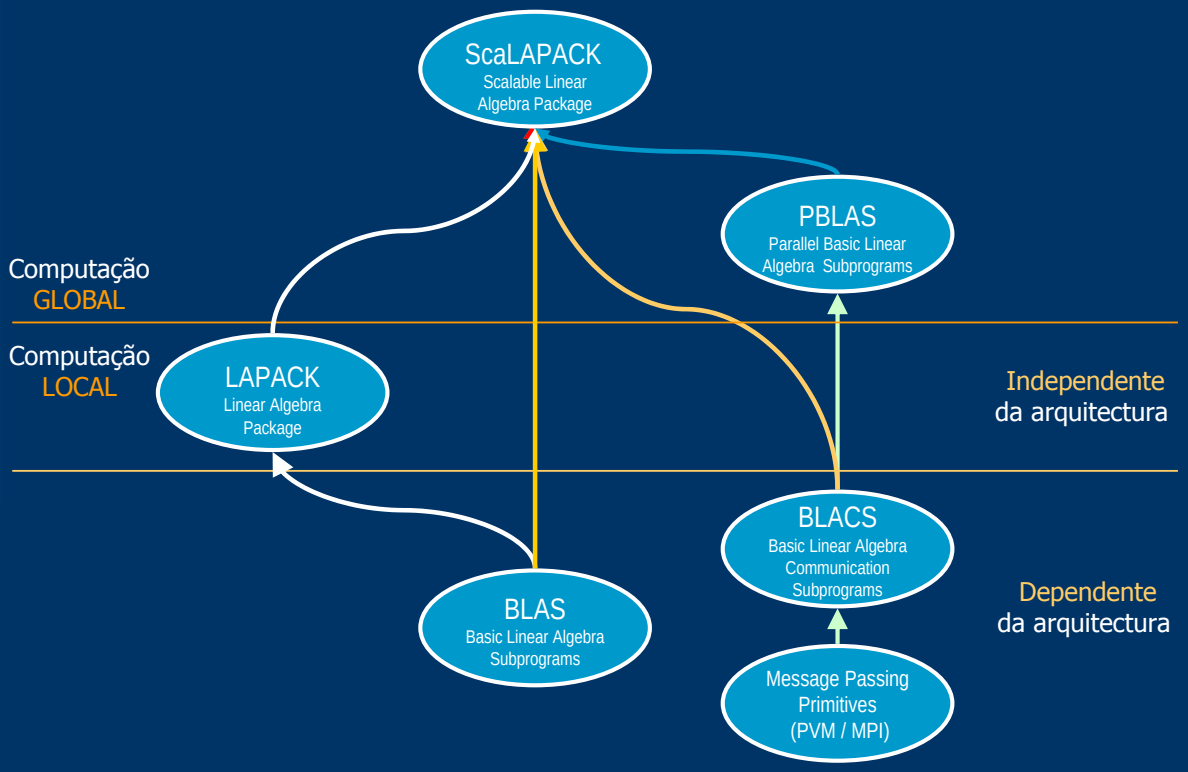
ScaLAPACK: biblioteca (II)

- Soluciona os mesmos problemas que LAPACK mas em paralelo
  - Resolução de sistemas de equações lineares, problemas lineares de mínimos quadrados, problemas de valores próprios, problemas de valores singulares, decomposição de matrizes, cálculo de normas, ...
- Desenvolvida ao estilo Single Program Multiple Data
- Usa o sistema explícito de troca de mensagens para a comunicação entre processos
  - MPI, PVM, CMMD, MPL, NX

ScaLAPACK: biblioteca (III)

- Distribuição dos dados de forma cíclica por blocos
- Algoritmos orientados a blocos matriciais
- Procura ser a extensão da LAPACK para sistemas de memória distribuida
- Estrutura análoga à da LAPACK
  - Rotinas driver : resolvem problemas completos
  - Rotinas computacionais : resolvem tarefas concretas
  - Rotinas auxiliares : resolvem tarefas de menor complexidade

ScaLAPACK: biblioteca (IV)



ScaLAPACK: biblioteca (V)

- Componentes
  - ScaLAPACK : Scalable Linear Algebra Package
  - BLAS : Basic Linear Algebra Subprograms
  - LAPACK : Linear Algebra Package
  - BLACS : Basic Linear Algebra Communication Subprograms
    - Biblioteca com as rotinas dedicadas ao mecanismo de comunicação entre os processos
  - PBLAS : Parallel Basic Linear Algebra Subprograms
    - Conjunto de rotinas para memória distribuida análogas às de BLAS

ScaLAPACK: nomenclatura

- Semelhante à da LAPACK : PxYYZZZ
  - P : identifica que as operações são realizadas em paralelo
  - x : tipo de dados
  - YY : tipo de matriz
    - GB : banda geral
    - GE : densa geral
    - GG : densa geral generalizada
    - HE : hermítica geral
    - OR : ortogonal geral
    - SY : simétrica geral
    - UN : unitária geral
    - ...
  - ZZZ : tipo de método

ScaLAPACK

BLACS

www.netlib.org/blacs/index.html

BLACS: introdução

- Objectivos
  - Facilidade de implementação
    - Simplifica a troca de mensagens entre os processos, permitindo reduzir os erros de implementação
  - Facilidade de utilização
    - Está a um nível mais elevado, permitindo uma melhor utilização por parte de programadores menos experientes
  - Portabilidade
    - Proporciona uma interface que é suportada por uma ampla gama de arquitecturas de memória distribuida

BLACS: malha de processos (I)

- Mapeamento de P processos em um grid 2D

Vector linear de ID de processos

0	1	2	...	P-1

Row-major order

	0	1	2	3
0	0	1	2	3
1	4	5	6	7

8 processos mapeados em um grid de 2x4

	0	1
0	0	1
1	2	3
2	4	5

6 processos mapeados em um grid de 3x2

Column-major order

	0	1	2	3
0	0	2	4	6
1	1	3	5	7

8 processos mapeados em um grid de 2x4

	0	1
0	0	3
1	1	4
2	2	5

6 processos mapeados em um grid de 3x2

BLACS: malha de processos (II)

- Os P processos são distribuidos em um grid 2D
  - Pr processos por coluna
  - Pc processos por linha

  } P = Pr * Pc

- Cada processo pode ser referenciado pelas suas coordenadas (pr,pc)
  - 0 ≤ pr ≤ Pr-1
  - 0 ≤ pc ≤ Pc-1

	0	1	2	3
0	0	1	2	3
1	4	5	6	7

Pr = 2
Pc = 4

8 processos mapeados em um grid de 2x4

BLACS: malha de processos (III)

- Definição do grid 2D

$$Grid_{Pr\times Pc} = \{(pr, pc) : 0 \le pr \le Pr-1 \ \wedge \ 0 \le pc \le Pc-1\}$$

- Função de localização dos processos

$$\begin{array}{ccccc} \phi & : & \{0,1,\mathrm{K}\ ,\ p-1\} & \rightarrow & Grid_{Pr\times Pc} \\ & & i & \alpha & \left(\lfloor i/Pc \rfloor, i \bmod Pc\right) \end{array}$$

- Função de identificação dos processos

$$\begin{array}{ccccc} \phi^{-1} & : & Grid_{Pr\times Pc} & \rightarrow & \{0,1,\mathrm{K}\ ,\ p-1\} \\ & & (pr,\ pc) & \alpha & pr * Pc + pc \end{array}$$

BLACS: malha de processos (IV)

- Exemplo

Função de localização dos processos

$$\phi : \{0,1,\mathrm{K}\ ,p-1\} \rightarrow Grid_{Pr\times Pc}$$
$$i \quad \alpha \quad \left(\left\lfloor i/Pc \right\rfloor, i \bmod Pc\right)$$

Função de identificação dos processos

$$\phi^{-1} : Grid_{Pr\times Pc} \rightarrow \{0,1,\mathrm{K}\ ,p-1\}$$
$$(pr,\ pc) \quad \alpha \quad pr * Pc + pc$$

$$\phi(3)=\left(\left\lfloor 3/4 \right\rfloor, 3 \bmod 4\right)=(0,\ 3)$$

$$\phi(6)=\left(\left\lfloor 6/4 \right\rfloor, 6 \bmod 4\right)=(1,\ 2)$$

$$\phi^{-1}(0,\ 2)=0*4+2=2\equiv P_2$$

$$\phi^{-1}(1,\ 2)=1*4+2=6\equiv P_6$$

	0	1	2	3
0	0	1	2	3
1	4	5	6	7

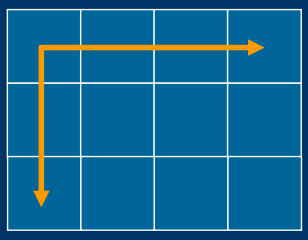
8 processos mapeados em um grid de 2x4

BLACS: contextos

- Em BLACS, todo o grid de processos está englobado dentro de um contexto
- Um contexto é um filtro que permite separar as mensagens de distintos grids de processos
  - Equivalente ao *MPI communicator*
- Os contextos permitem
  - Criar grupos arbitrários de processos
  - Criar grids disjuntos ou não
  - Isolar grids para que não interfiram com outros grids

BLACS: âmbito das operações

- Operações em que participam um determinado grupo de processos
- Em um grid 2D há 3 âmbitos naturais que afectam
  - Toda uma linha de processos
  - Toda uma coluna de processos
  - Todos os processos



- O "aproveitamento" do hardware deve ser garantido pelas bibliotecas de troca de mensagens sobre as quais BLACS trabalha

ScaLAPACK

PBLAS Quick Reference Guide

www.netlib.org/scalapack/html/pblas_qref.html

PBLAS: introdução

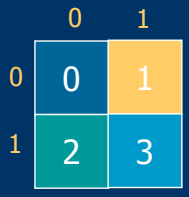
- PBLAS oferece à ScaLAPACK as rotinas equivalentes que BLAS oferece à LAPACK
  - Conjunto de rotinas para memória distribuida
    - Consegue-se que as implementações em ScaLAPACK sejam bastante parecidas às implementações em LAPACK
- PBLAS está estruturada em 3 níveis
  - PBLAS nível 1 : operações entre vectores
  - PBLAS nível 2 : operações entre matrizes e vectores
  - PBLAS nível 3 : operações entre matrizes
- Nomenclatura das rotinas de PBLAS : PxYYZZZ

PBLAS: distribuição dos dados (I)

- Distribuição cíclica por blocos
- Propriedades
  - Engloba outras distribuições de dados
  - Permite um balanceamento da carga
  - Favorece a performance e a escalabilidade
- O programador deve distribuir os dados pelos processos antes de chamar as rotinas que sobre eles operam
- Cada processo tem armazenado na sua memória local o conjunto de dados que lhe corresponde

PBLAS: distribuição dos dados (II)

- Distribuição cíclica por blocos
  - Exemplo
    - Matriz de dimensão 5x7
    - Grid de processos 2x2
    - Blocos matricais de dimensão 2x2



grid de 2x2

$$\left[\begin{array}{ccc|cc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} & a_{17} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} & a_{27} \\ \hline a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} & a_{37} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} & a_{47} \\ \hline a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} & a_{57} \end{array}\right]$$

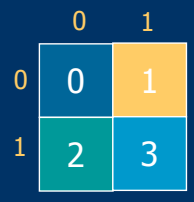
$$\left[\begin{array}{cccc|ccc} a_{11} & a_{12} & a_{15} & a_{16} & a_{13} & a_{14} & a_{17} \\ a_{21} & a_{22} & a_{25} & a_{26} & a_{23} & a_{24} & a_{27} \\ a_{51} & a_{52} & a_{55} & a_{56} & a_{53} & a_{54} & a_{57} \\ \hline a_{31} & a_{32} & a_{35} & a_{36} & a_{33} & a_{34} & a_{37} \\ a_{41} & a_{42} & a_{45} & a_{46} & a_{43} & a_{44} & a_{47} \end{array}\right]$$

PBLAS: distribuição dos dados (III)

- Todos os parâmetros que definem uma matriz distribuida são encapsulados em um vector de inteiros designado por *descriptor* (array DESC_)
- Rotina DESCINIT para inicializar o *descriptor*
- Elementos do *descriptor* DESC_
  - [1] TYPE_ : tipo de descriptor
  - [2] CTXT_ : contexto de BLACS
  - [3] M_ : número de linhas da matriz
  - [4] N_ : número de colunas da matriz
  - [5] MB_ : tamanho do bloco de linhas
  - [6] NB_ : tamanho do bloco de colunas
  - [7] RSCR_ : linha do processo que contém a primeira linha da matriz
  - [8] CSCR_ : coluna do processo que contém a primeira coluna da matriz
  - [9] LLD_ : dimensão principal da matriz local

PBLAS: distribuição dos dados (IV)

- Distribuição cíclica por blocos
  - Exemplo
    - Matriz de dimensão 5x7
    - Grid de processos 2x2
    - Blocos matricais de dimensão 2x2



grid de 2x2

$$\begin{array}{|cccc|ccc|}
\hline
a_{11} & a_{12} & a_{15} & a_{16} & a_{13} & a_{14} & a_{17} \\
a_{21} & a_{22} & a_{25} & a_{26} & a_{23} & a_{24} & a_{27} \\
a_{51} & a_{52} & a_{55} & a_{56} & a_{53} & a_{54} & a_{57} \\
\hline
a_{31} & a_{32} & a_{35} & a_{36} & a_{33} & a_{34} & a_{37} \\
a_{41} & a_{42} & a_{45} & a_{46} & a_{43} & a_{44} & a_{47} \\
\hline
\end{array}$$

DESC_A

- TYPE_A = 1 (densa)
- CTXT_A = #
- M_A = 5
- N_A = 7
- MB_A = 2
- NB_A = 2
- RSRC_A = 0
- CSRC_A = 0
- LLD_A = 3 ou 2

ScaLAPACK

Fortran 90

Experiências computacionais

Fortran 90: compilação (I)

- Atenção ao compilador
  - A complição de códigos com MPI deve ser realizada com o correcto comando mpi
    - Programas implementados em Fortran 90 : mpiifort / mpif90
- Linkagem de forma estática
  - A linkagem à principal libraria de MPI (libmpi) é feita de forma estática
    - Usa-se a libraria libmpi.a e não a libraria libmpi.so
    - A directiva de compilação inclui a opção –static_mpi

Fortran 90: compilação (II)

- Directivas de compilação
  - mpiifort –static_mpi –o nomeExecutável nomeProgramaPrincipal.f90

    nomeModulo1.f90 nomeModulo2.f90 ...

    linkagem ao módulo de ScaLAPACK (libmkl_scalapack.a)

    linkagem ao módulo de BLACS (libmkl_blacs_intelmpi.a)

    linkagem ao módulo de LAPACK (libmkl_lapack.a)

    linkagem ao módulo de BLAS (libmkl_em64t.a)

    linkagem ao módulo estático (libguide.a)

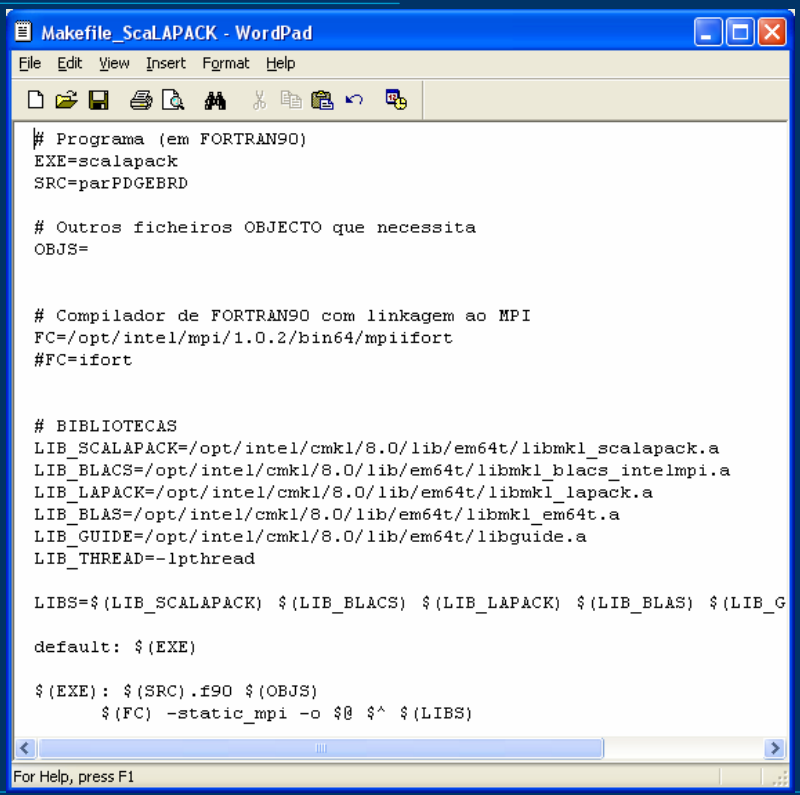
    linkagem ao módulo de *threads* (-lpthread)

Fortran 90: compilação (III)

- Módulo de ScaLAPACK
  - As rotinas de PBLAS estão incluídas na libraria da ScaLAPACK (libmkl_scalapack.a)
- Pesquisar elementos dentro de uma libraria
  - Usar o comando nm o qual lista os símbolos existentes em ficheiros objecto
  - Pesquisa de elementos de PBLAS
    - nm /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libmkl_scalapack.a | grep pdnmr2
    - nm /opt/intel/cmkl/8.0/lib/em64t/libmkl_scalapack.a | grep pddot

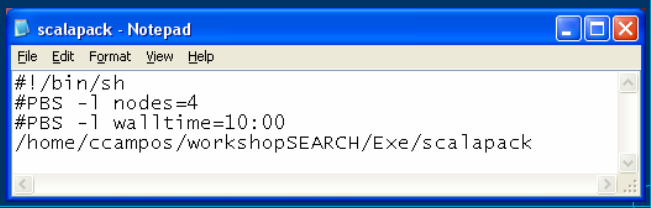
Fortran 90: compilação (IV)

- Compilação
  - Fazer make



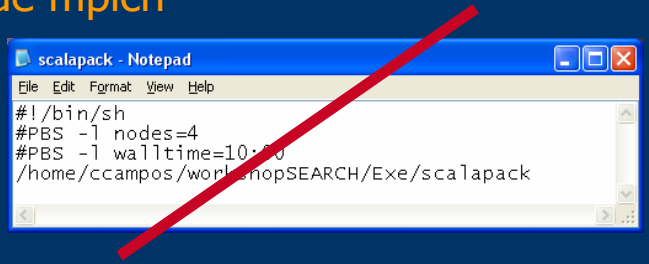
Fortran 90: execução (I)

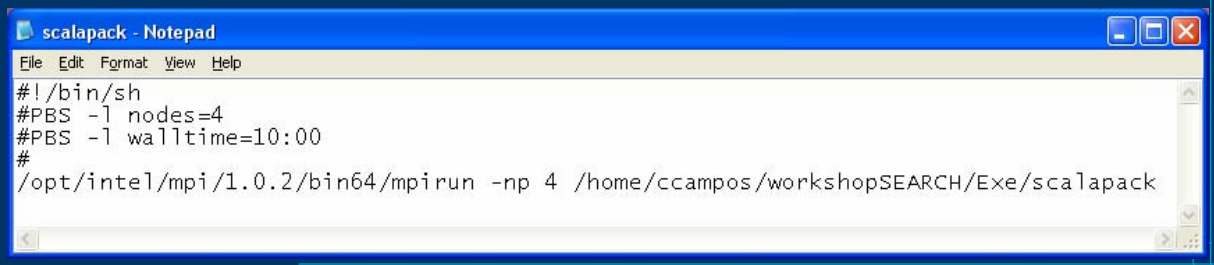
- Processamento "ligeiro"
  - Executar o comando mpirun com as opções adequadas
    - Executar o comando
      - mpirun –np # ./nomeExecutavel
- Processamento massivo
  - Criar os ficheiros *script* com as directivas PBS desejadas e submeter o trabalho ao sistema de gestão de filas
    - Executar o comando
      - qsub nomeScript



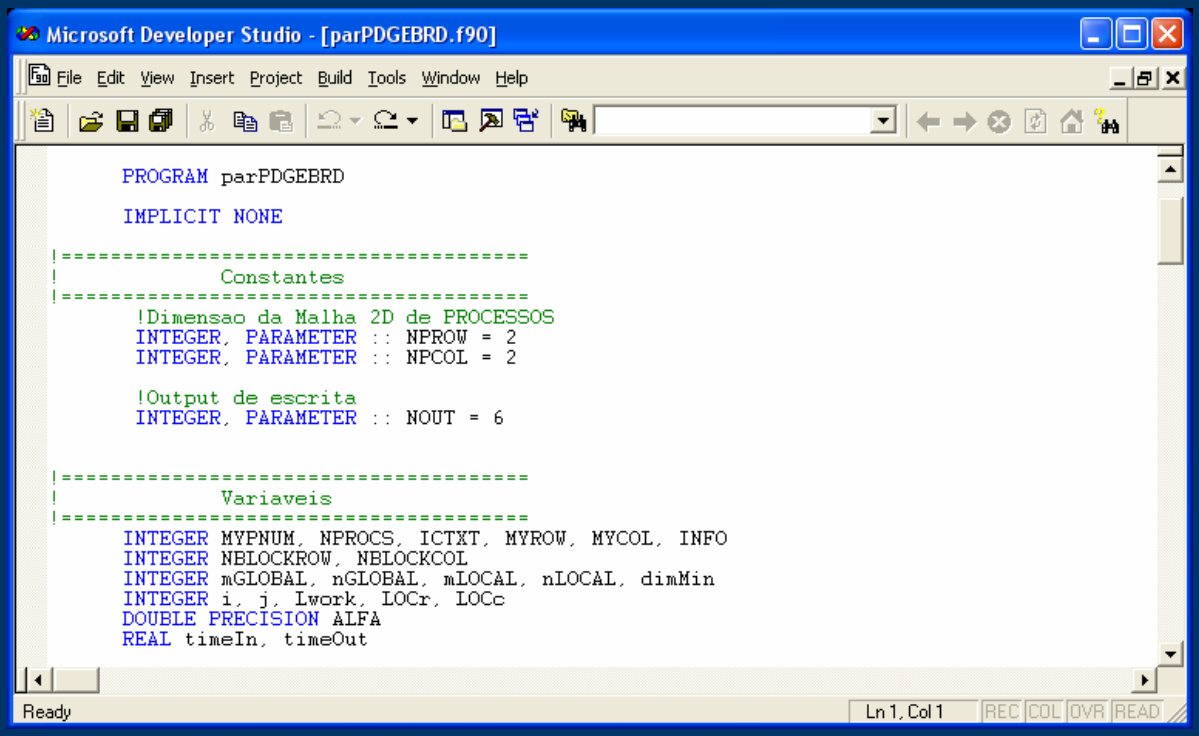
Fortran 90: execução (II)

- Processamento massivo
  - O script anterior não é correcto e gera erros de execução devido ao facto do comando qsub usar o mpirun de mpich

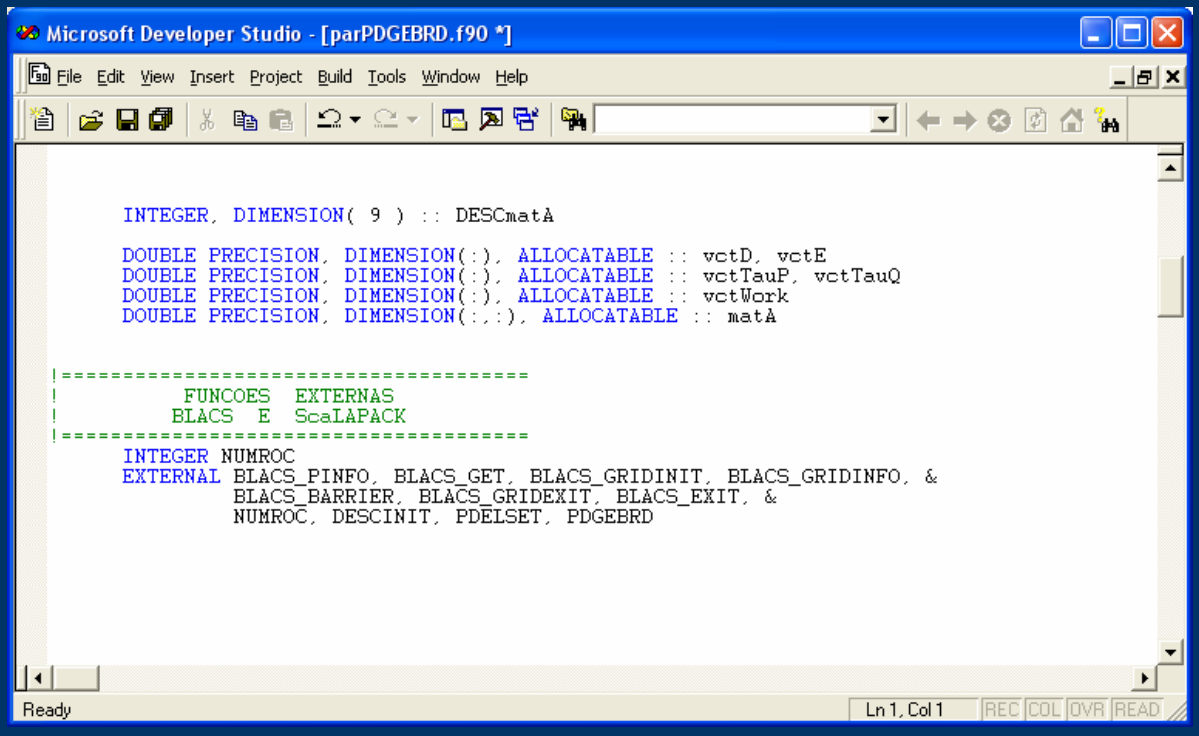




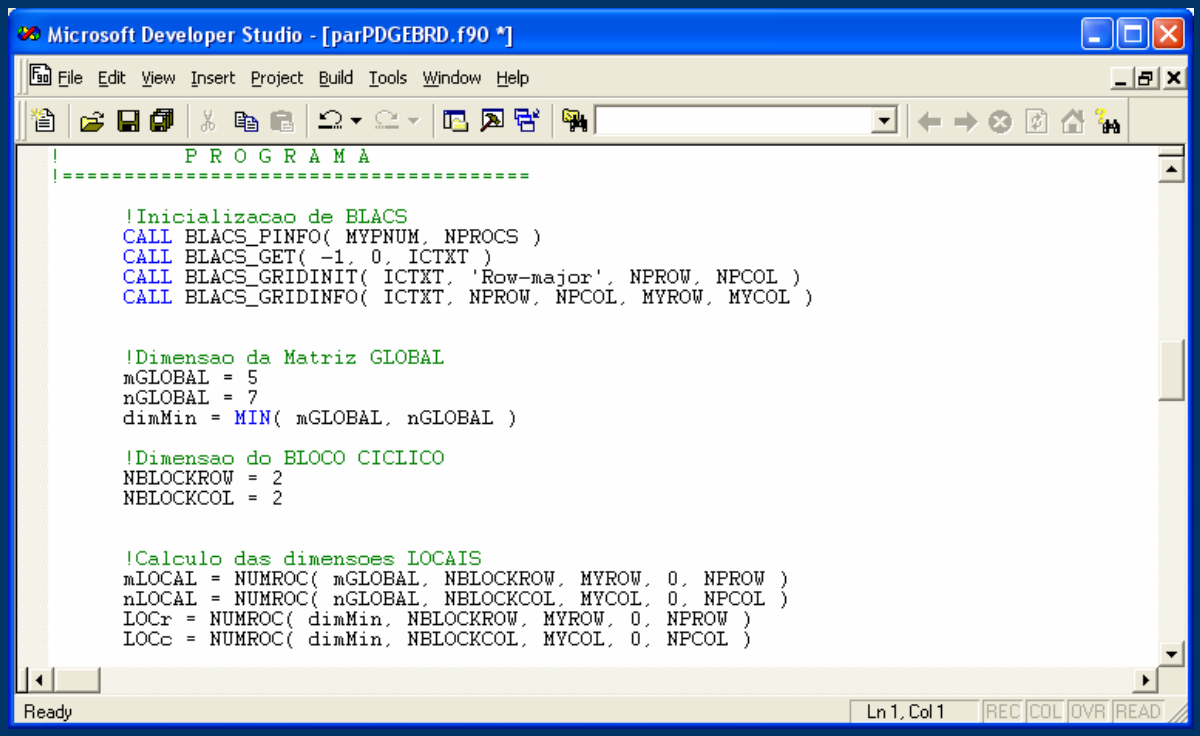
Fortran 90: programa principal (I)



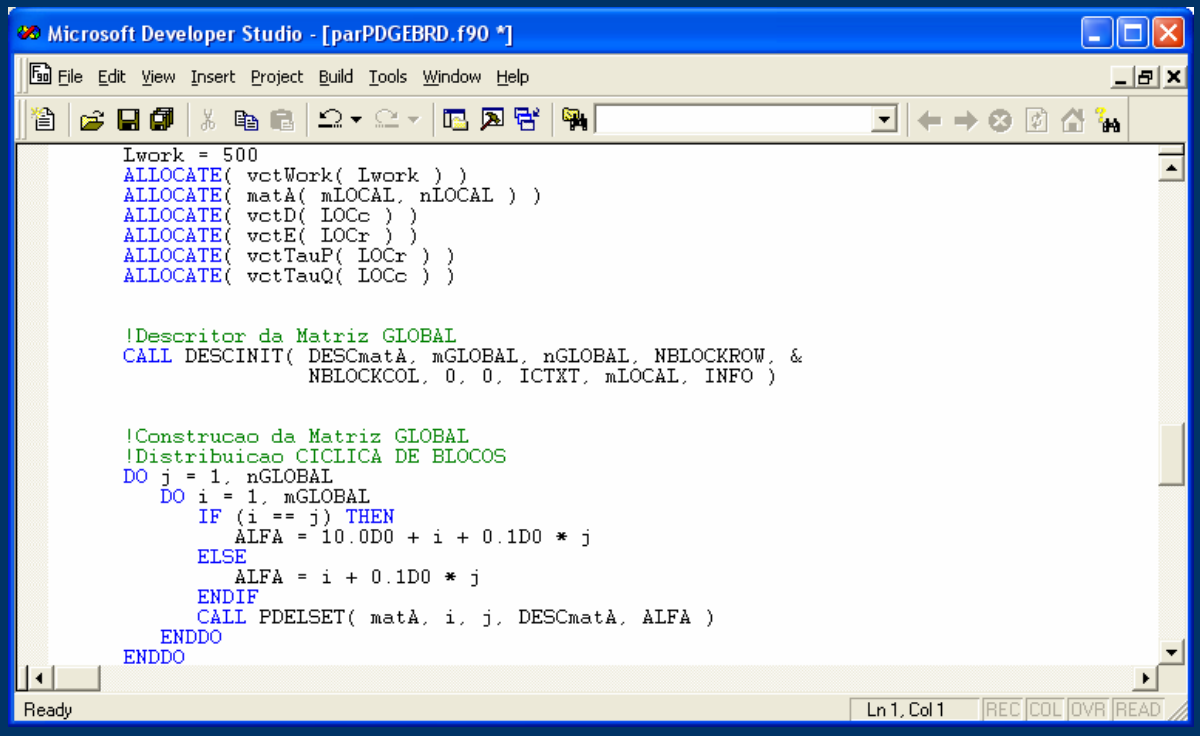
Fortran 90: programa principal (II)



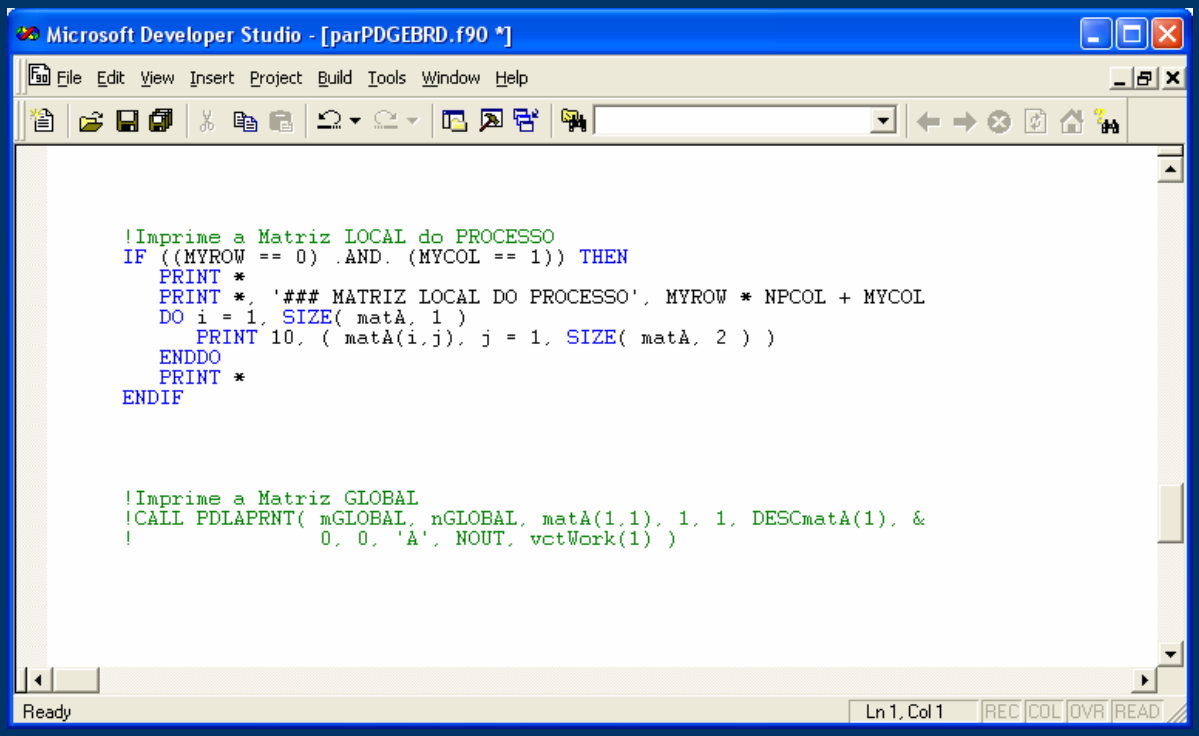
Fortran 90: programa principal (III)



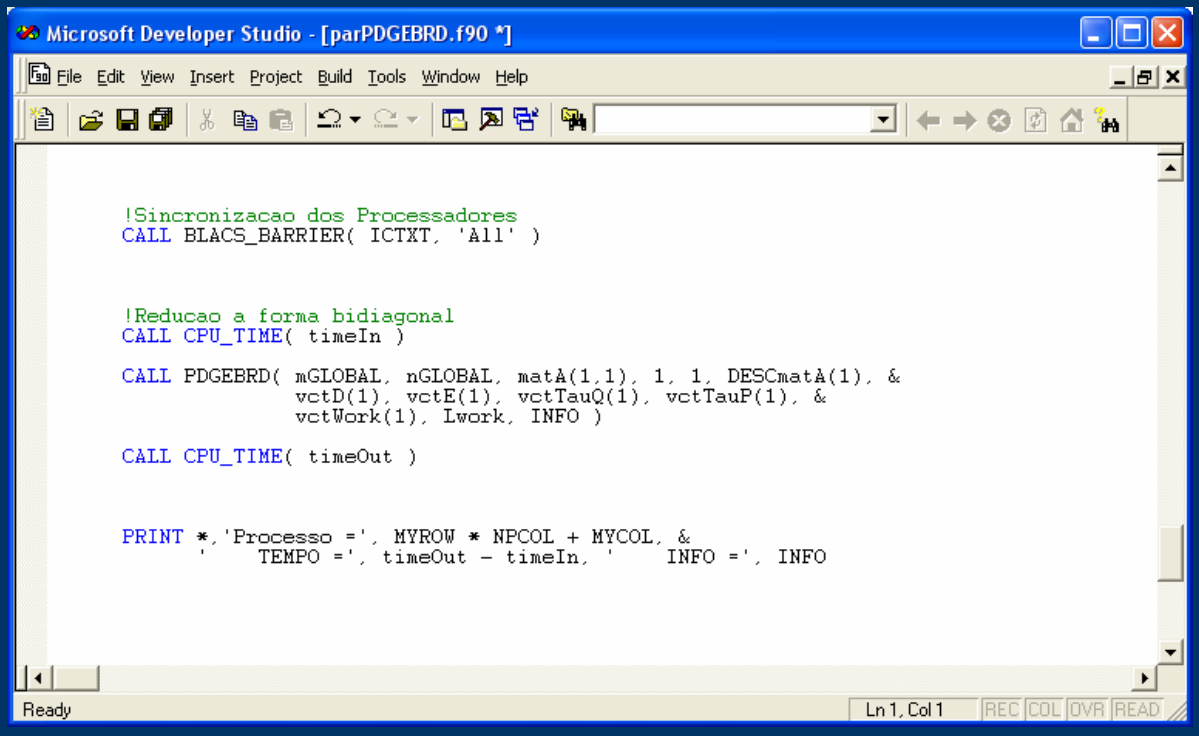
Fortran 90: programa principal (IV)



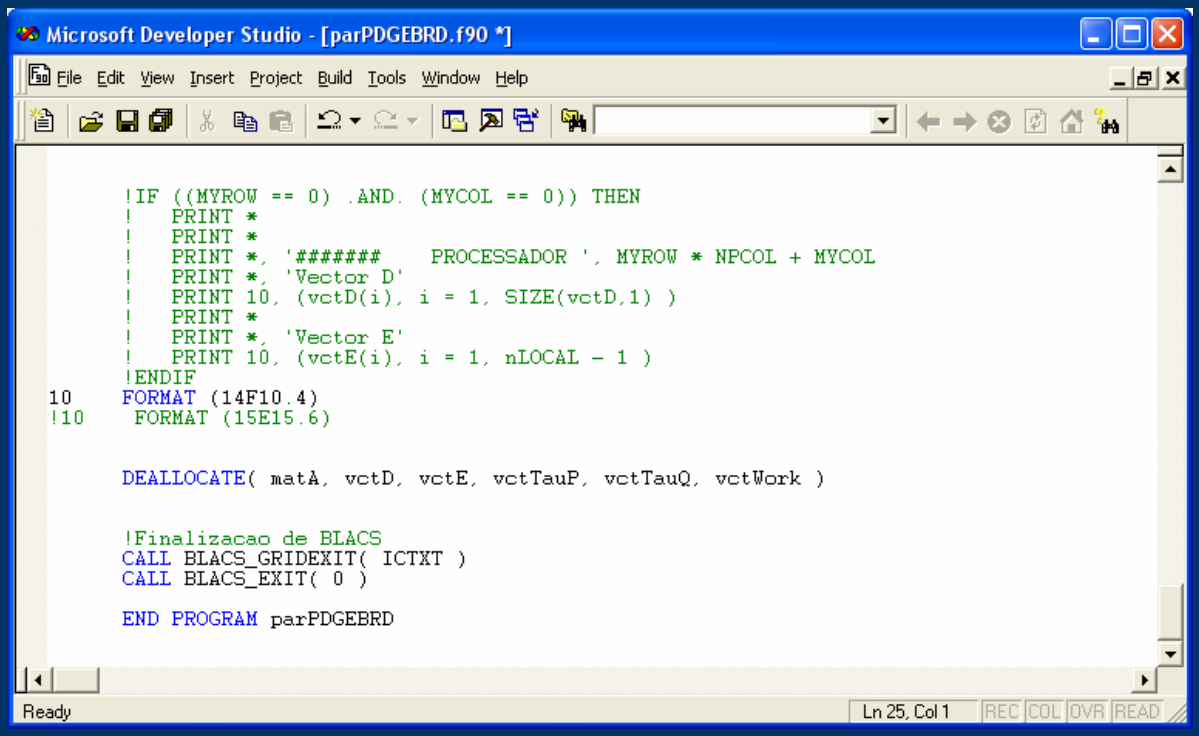
Fortran 90: programa principal (V)



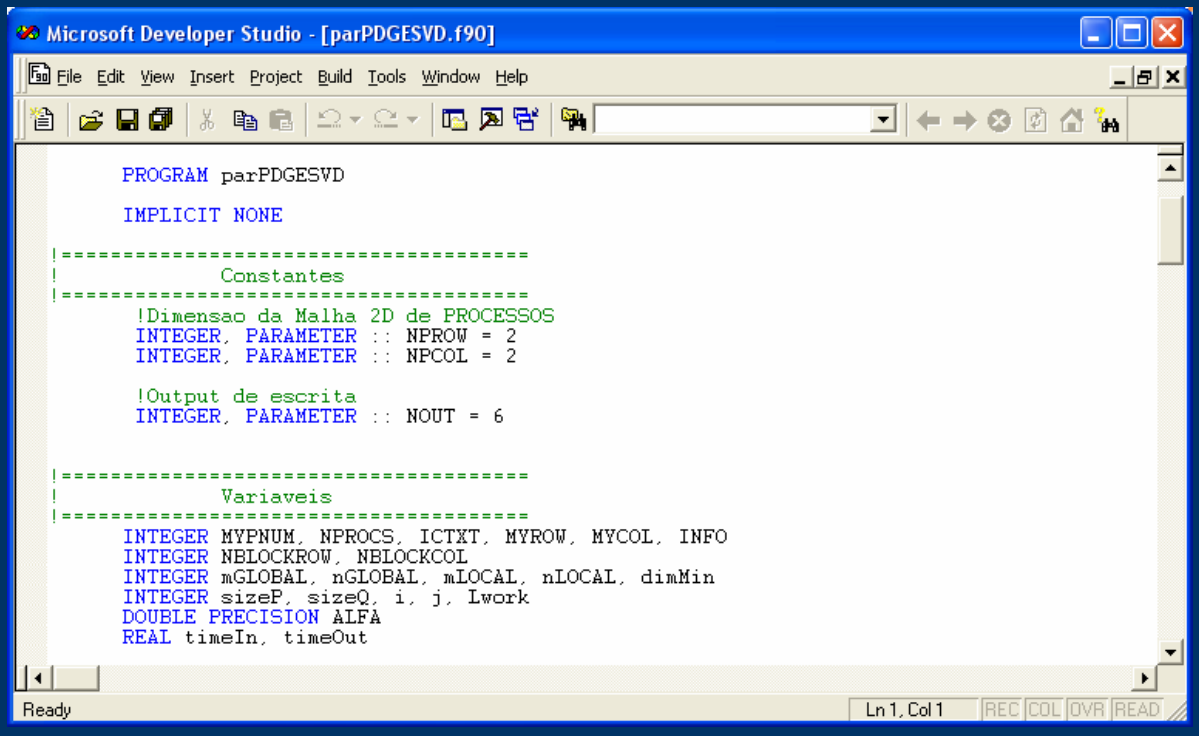
Fortran 90: programa principal (VI)



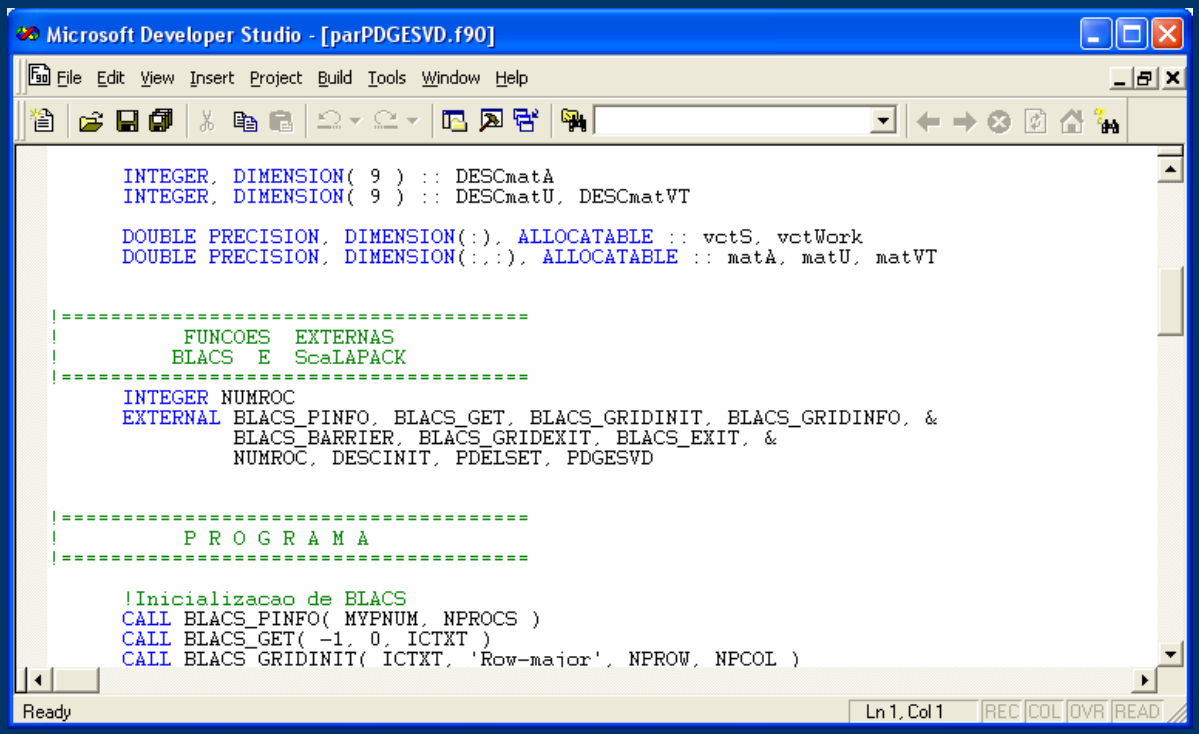
Fortran 90: programa principal (VII)



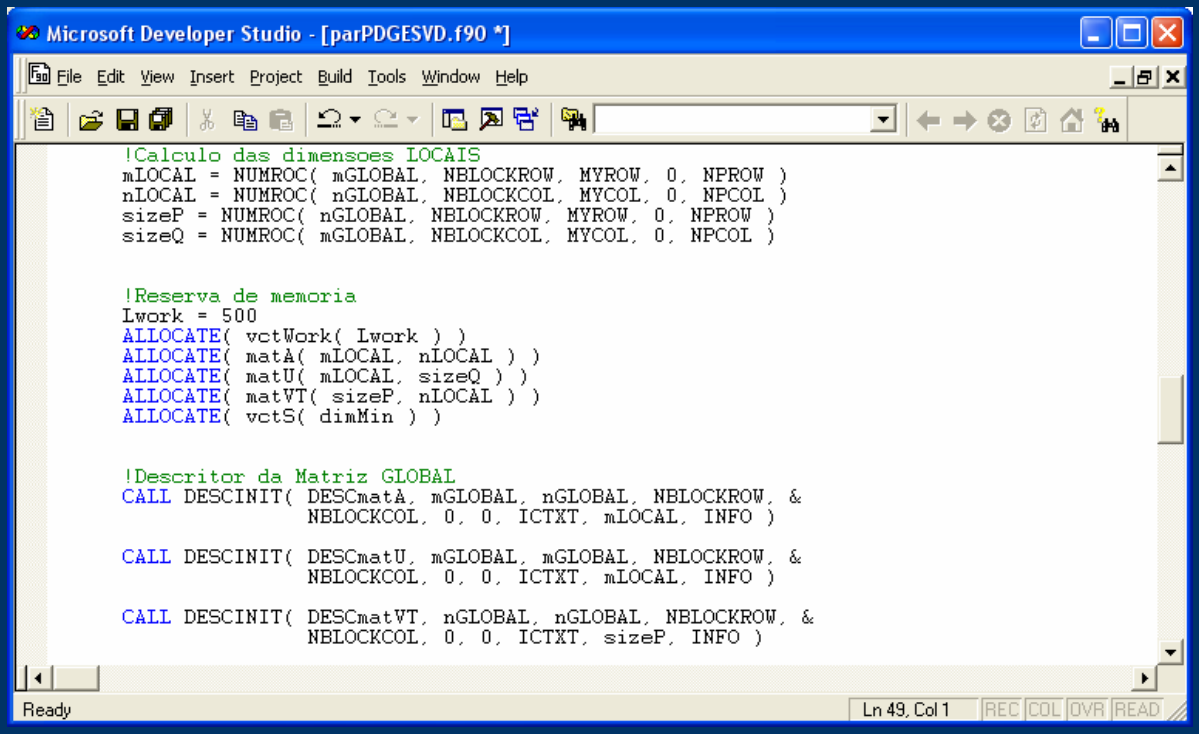
Fortran 90: programa principal (VIII)



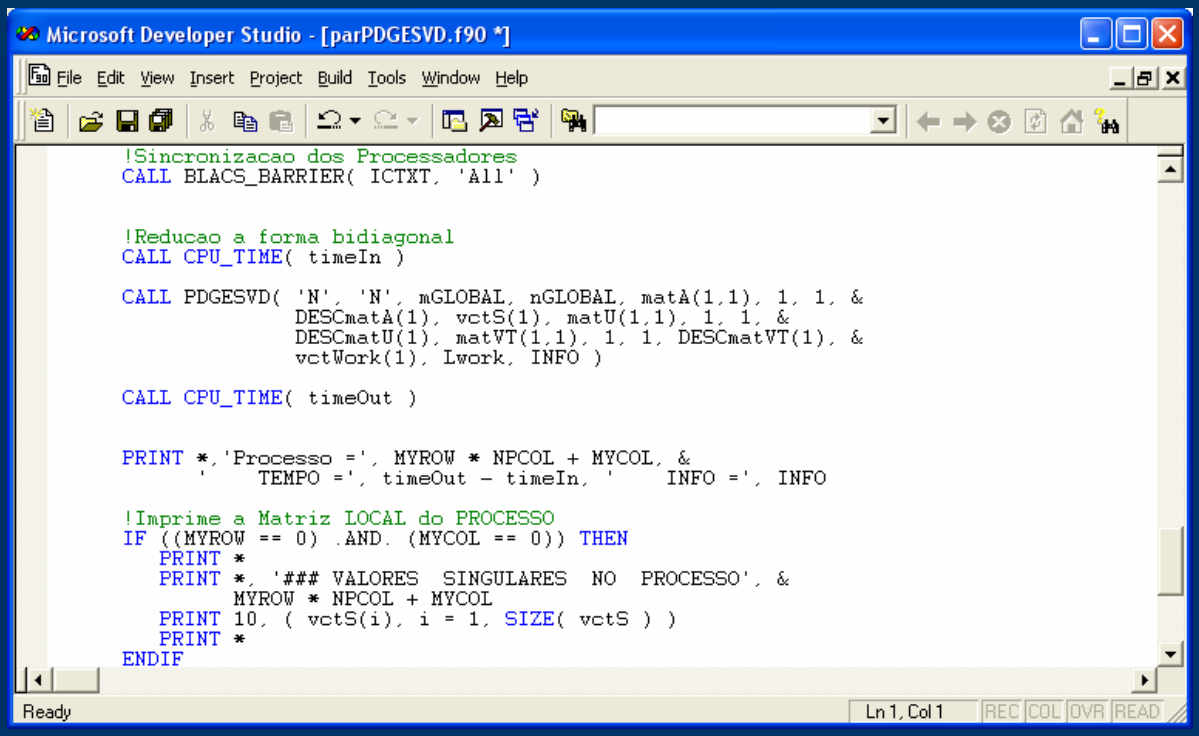
Fortran 90: programa principal (IX)



Fortran 90: programa principal (X)



Fortran 90: programa principal (XI)



Alguns tópicos adicionais

Exemplos com MPI

Exemplo de um algoritmo orientado a blocos

Exemplos com MPI: intel/mpi

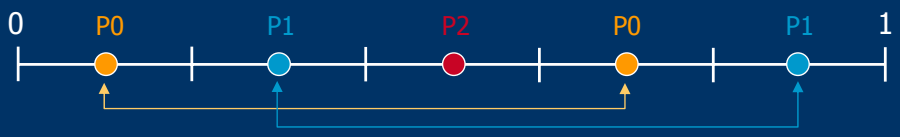
- Exemplo em /opt/intel/mpi/1.0.2/test
  - Ficheiro test.f90
  - Exemplo típico de "Hello world"
- Como o ambiente de trabalho está configurado para usar esta versão do MPI, podemos compilar e executar o programa exemplo usando os comandos habituais
  - Compilação : mpiifort –static_mpi –o tst test.f90
  - Execução : mpirun –np # ./tst

Exemplos com MPI: mpich/intel

- Exemplo em /opt/mpich/intel/examples
  - Ficheiro pi3f90.f90
  - Cálculo de uma aproximação para o valor de π

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx = \pi \approx \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \frac{4}{1+\left(\frac{1}{n}(k-0.5)\right)^2}$$

  - Dado o número de processos np, o utilizador deve definir o número de subintervalos (n) em que se subdivide o intervalo [0, 1]



Um algoritmo: bidiagonalização (I)

- Redução de uma matriz à forma bidiagonal superior
  - Dada a matriz $A \in \Re^{m\times n}$ (m>n)

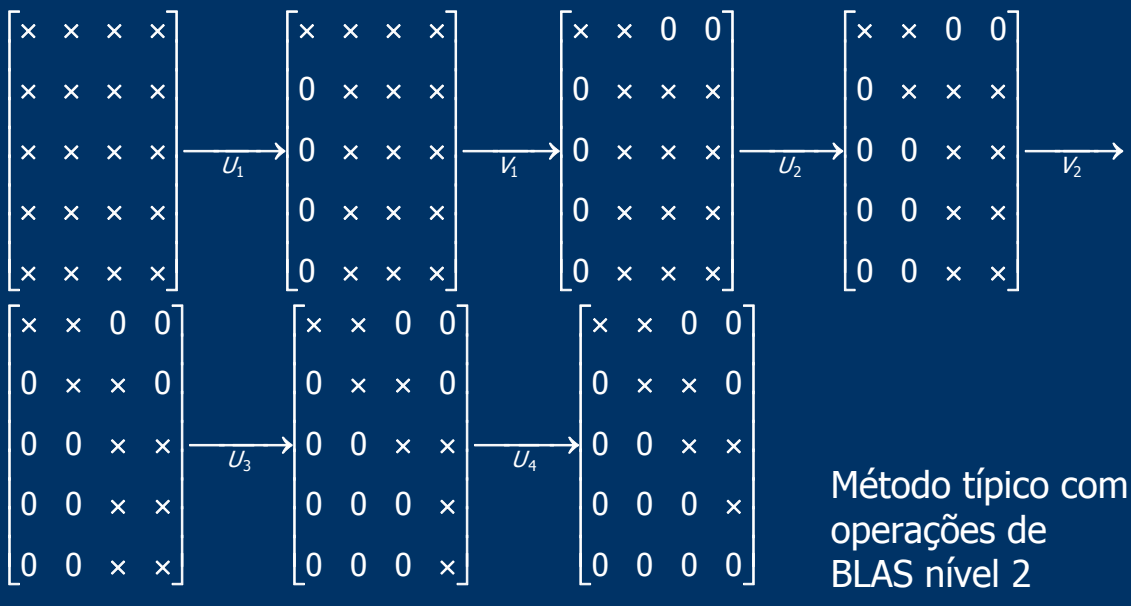
$$A = U_B \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} V_B^t \quad \text{com} \quad B = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_n \\ & & & \alpha_n \end{bmatrix}$$

onde $U_B = U_1 U_2 \cdots U_n \in \Re^{m\times m}$ e

$V_B = V_1 V_2 \cdots V_{n-2} \in \Re^{n\times n}$ são matrizes ortogonais

Um algoritmo: bidiagonalização (II)

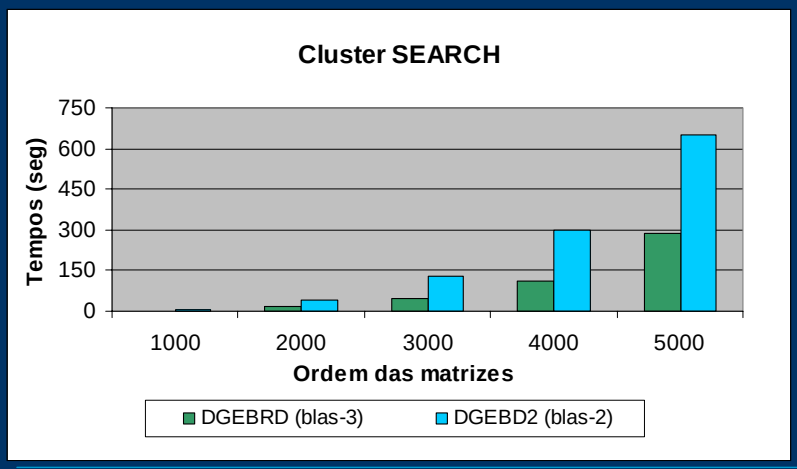
- Método de Golub-Kahan



Método típico com operações de BLAS nível 2

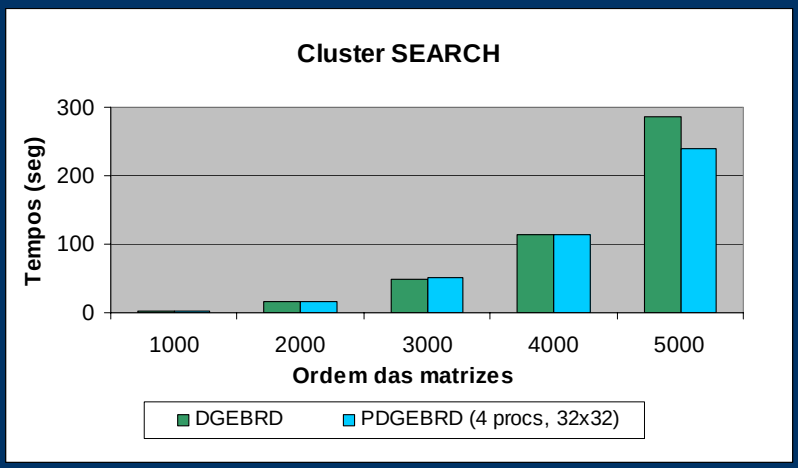
Um algoritmo: bidiagonalização (III)

- Método de Golub-Kahan
  - Versão sequêncial orientada a blocos matriciais
    - Realiza-se a acumulação das transformações ortogonais e só depois de reduzir o bloco matricial à forma bidiagonal superior é que se actualiza a restante parte da matriz



Um algoritmo: bidiagonalização (IV)

- Método de Golub-Kahan
  - Versão paralela com 4 processadores



    - Necessidade de encontrar a melhor performance...

Muito obrigado pela vossa atenção!

Perguntas?