

Resolução de Problemas de Álgebra Linear com a BLAS e o C-XSC: um estudo comparativo

Cassiano Flôres Perin, Alexandre Almeida,
Carlos Amaral Hölbíg

Curso de Ciência da Computação – Universidade de Passo Fundo (UPF)
Campus 1 – BR 285 – Bairro São José – CEP 91.501-970 – Passo Fundo – RS – Brasil
{43911, 68935}@lci.upf.br, holbig@upf.br

Introdução

A álgebra linear vem sendo utilizada para a resolução de uma grande quantidade de problemas científicos que normalmente são baseados em cálculos matriciais e vetoriais [CLA 2000]. Com o avanço do uso de computadores de alto desempenho e a utilização de máquinas paralelas para a resolução destes problemas, tornou-se necessário explorar novas técnicas e tecnologias que explorassem de forma satisfatória os aspectos da arquitetura destas máquinas. Em vista disso, foi criada a biblioteca BLAS, que é constituída de funções para a resolução das operações básicas da álgebra linear, e que tem a capacidade de tirar proveito da plataforma para a qual foi compilada, havendo, dessa forma, um ganho de desempenho na resolução das operações. Além do aspecto desempenho, abordado pela BLAS, outro fator importante em Computação Científica é a qualidade numérica (exatidão) do resultado. Esse aspecto é trabalhado pela biblioteca C-XSC que oferece operações numéricas com alta exatidão, porém a um custo computacional maior [HOF 2001]. Devido aos fatores apresentados, o objetivo dessa pesquisa é a implementação de alguns problemas tradicionais em álgebra linear utilizando as bibliotecas científicas BLAS (alto desempenho) e C-XSC (alta exatidão), apresentando, ao final, uma análise do desempenho dos programas e da qualidade numérica dos resultados obtidos.

Bibliotecas Numéricas Computacionais

Neste item são apresentadas as bibliotecas numéricas computacionais BLAS (biblioteca de alto desempenho – distribuição ATLAS) e C-XSC (biblioteca de alta exatidão – versão 2.0) utilizadas nesta pesquisa.

Biblioteca BLAS

A primeira versão da BLAS foi chamada de BLAS de Nível 1 e implementou funções para a resolução de operações entre escalares e vetores. Posteriormente, foram lançadas mais duas versões, a BLAS de Nível 2 (para operações entre vetores e matrizes) e a BLAS de Nível 3 (para operações entre matrizes), onde foram incluídas novas funções para a resolução de outros tipos de problemas numéricos.

Biblioteca C-XSC

O C-XSC (C – *eXtension for Scientific Computation*) é uma ferramenta para desenvolvimento de algoritmos numéricos com a geração de resultados com alta exatidão e verificados automaticamente, estando disponível para muitos ambientes computacionais que possuam um compilador C++. Entre suas principais características pode-se destacar: aritmética intervalar para números reais, complexos, intervalares e intervalares complexos com propriedades definidas matematicamente; vetores e matrizes dinâmicos; *subarrays* de vetores e matrizes; tipos de dados de alta exatidão; operadores aritméticos predefinidos com alta exatidão; aritmética de múltipla precisão dinâmica e funções padrão; controle de arredondamento para os dados de entrada e saída; biblioteca de rotinas para a resolução de problemas numéricos; e resultados numéricos com rigor matemático ([HAM 95], [HOF 2001] e [KLA 93]).

Testes Realizados

Para comparar o desempenho obtido pelo uso das bibliotecas BLAS e C-XSC, foram realizados o cálculo do produto escalar, a multiplicação de matrizes e a resolução de sistemas de equações lineares através do método de Gauss-Jacobi, utilizando matrizes de ordem 128, 256, 512, 1024 e 2048, e vetores (para o produto escalar) de tamanhos 10000, 50000, 100000, 500000 e 1000000.

Dentre os resultados obtidos, destaca-se o alto desempenho obtido com o uso da BLAS e a qualidade numérica dos programas implementados com a biblioteca C-XSC, especialmente se os dados de entrada estiverem sujeitos à instabilidade numérica e/ou erros computacionais (arredondamento ou cancelamento). Os resultados sobre o desempenho são demonstrados através das figuras 1, 2 e 3.

A grande diferença no tempo de execução entre essas bibliotecas deve-se ao fato de que o C-XSC necessita simular, via *software*, um registrador de mais de 520 bytes onde são efetuadas as operações em ponto-flutuante para que, dessa forma, a qualidade do resultado seja garantida. Entretanto, devido a este fator, o tempo de execução de programas que utilizam essa característica é bem maior do que em relação a programas implementados em C/C++ que utilizam bibliotecas numéricas de alto desempenho como, no caso dessa pesquisa, a BLAS.

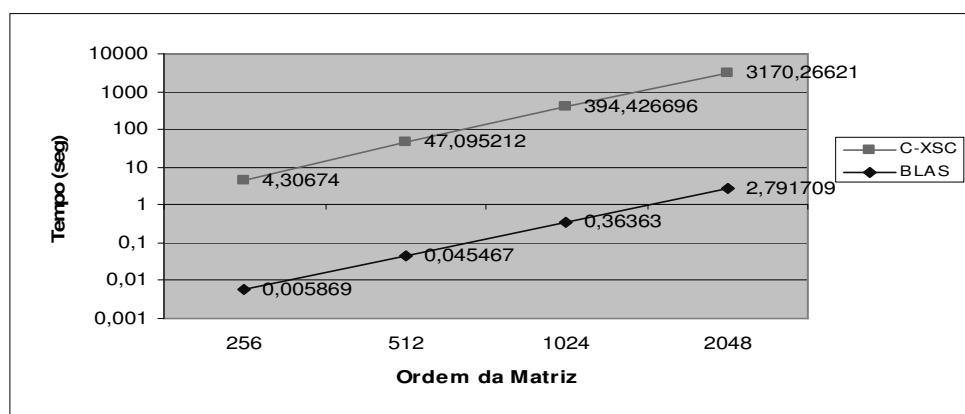


Figura 1. Tempo de execução da multiplicação de matrizes

Conclusões

Através dos resultados obtidos ao final desta pesquisa, pode-se concluir que, sendo a álgebra linear fundamental na resolução de problemas científicos, é de enorme importância a existência de um código otimizado para que se tenha bons resultados em termos de desempenho. Entretanto, não se pode deixar de considerar a exatidão dos resultados obtidos e alternativas para obtê-los. Nesse ponto é importante ressaltar que a simples escolha de uma ferramenta computacional que vise o desempenho ou a exatidão pode não ser suficiente para uma eficiente resolução do problema. É necessário se fazer uma análise da aplicação que se quer solucionar, dos cálculos que a compõem e da exatidão que essa aplicação necessita buscando, com isso, obter-se um ponto de equilíbrio entre o desempenho computacional e a exatidão dos resultados obtidos [HÖL 2005].

Nos programas utilizando a biblioteca BLAS foram utilizadas as funções **sdot**, **sgemm**, **saxpy**, **strsv** e **scopy**. Com isso, foi possível confirmar um ótimo desempenho da biblioteca BLAS comparada aos algoritmos escritos em C com a biblioteca C-XSC, mostrando tempos de execução bem abaixo dos outros programas. Nos testes de exatidão foi possível confirmar os excelentes resultados obtidos pela biblioteca C-XSC, que cumpre a meta para qual foi desenvolvida, retornando resultados com uma alta exatidão, algo fundamental na Computação Científica.

Referências

- [CLA 2000] CLAUDIO, D.; MARTINS, J.M.. **Cálculo Numérico Computacional**: teoria e prática. 3ª ed. Atlas, São Paulo-SP. 2000.
- [HOF 2001] HOFSCHUSTER, W.; KRÄMER, W.. **C-XSC 2.0**: A C++ Class Library for Extended Scientific Computing. Wuppertal, Germany: BUGH, Universität Wuppertal, 2001. (Preprint BUGHWWRSWT 2001/1).
- [HAM 95] HAMMER, R.; HOCKS, M.; KULISCH, U.; RATZ, D. **C-XSC Toolbox for Verified Computing I: basic numerical problems**. New York: Springer-Verlag, 1995.
- [KLA 93] KLATTE, R.; KULISCH, U.; WIETHOFF, A.; LAWOW, C.; RAUCH, M. **C-XSC - A C++ Class Library for Extended Scientific Computing**. New York: Springer-Verlag, 1993.
- [HÖL 2005] HÖLBIG, C. A.; MORANDI JÚNIOR, P. S.; CLAUDIO, D. M.; DIVERIO, T. A. Solving Real Life Applications With High Accuracy. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON PARALLEL COMPUTING, PARCO 2005.