

*Осенняя школа по информационным технологиям ОИЯИ*

*Суперкомпьютерные системы  
и особенности строения алгоритмов*

*Вл.В.Воеводин*

*Директор НИВЦ МГУ,  
Директор Филиала МГУ в г.Сарове*

*[voevodin@parallel.ru](mailto:voevodin@parallel.ru)*

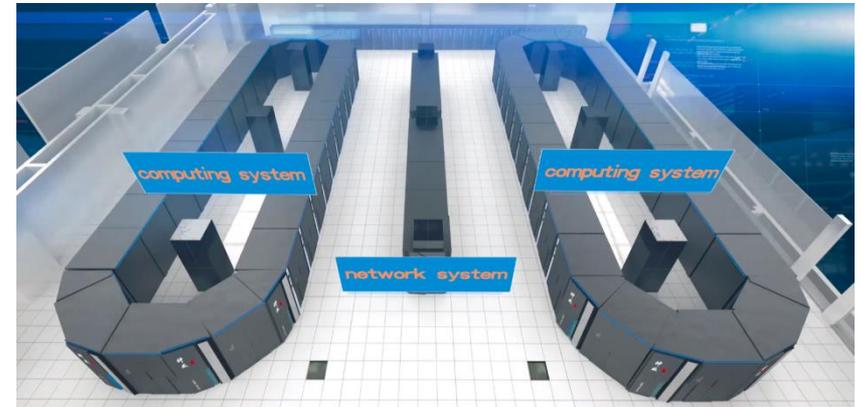
*14 ноября 2022, ОИЯИ, Дубна*

# Суперкомпьютерные технологии сегодня везде



Суперкомпьютерные технологии – это инструмент **обеспечения конкурентоспособности** науки, компаний, промышленности, экономики, страны.  
Сделать быстрее, дешевле, качественнее, быстрее вывести на рынок...

# Суперкомпьютер Sunway TaihuLight, Китай (#1 Top500 в 2016-2017 г.)



40 960 вычислительных узлов  
40 960 CPUs (SW26010, 260 ядер)

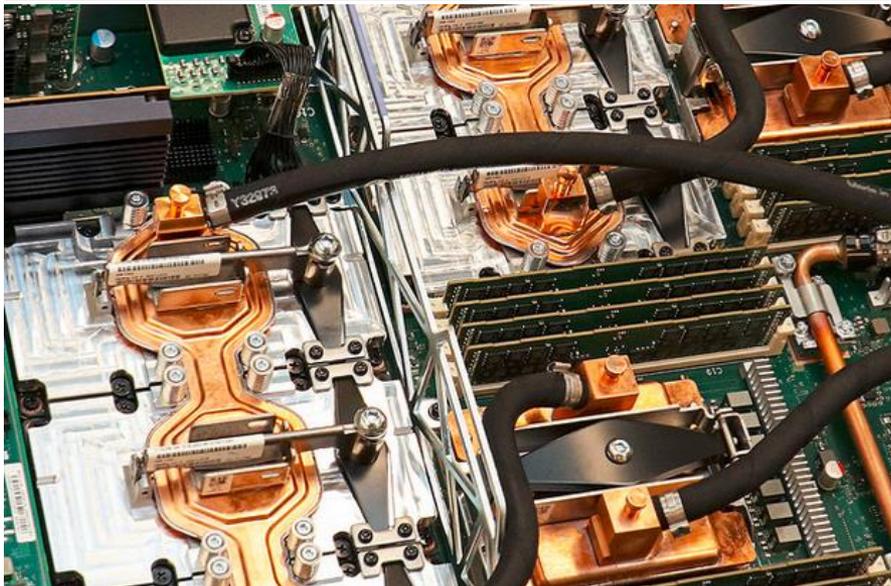
Всего: **10 649 600** процессорных ядер

Производительность:  
Пик (теория): **125.4 Pflop/s**  
Тест Linpack: **93 Pflop/s (74%)**

Оперативная память = **1.31 Пбайт**  
HDD = **20 Пбайт**

# Суперкомпьютер IBM Summit, США

(#1 Top500 в 2018-2019 г.)



4 608 вычислительных узлов,  
в каждом узле:  
2 x CPUs (IBM Power9, 22 ядра)  
6 x GPU (NVIDIA Tesla V100)

Производительность:  
Пик (теория): 200.8 Pflop/s  
Тест Linpack: 148.6 Pflop/s (74%)

Оперативная память = 10 Пбайт  
HDD = 250 Пбайт

# Суперкомпьютер Fujitsu Fugaku, Япония (#1 Top500 в 2020-2021 г.)



158 976 выч.узлов, 432 стойки  
7 630 848 ядер

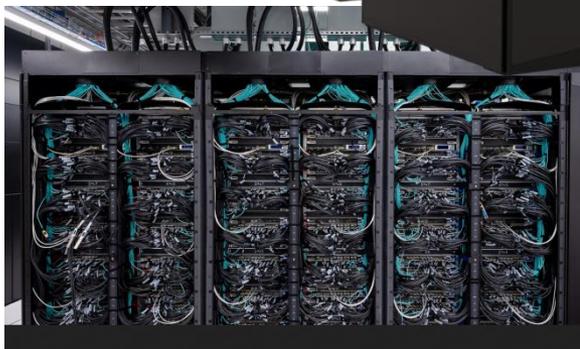
CPU: A64FX ARM v8.2-A, 48/52 cores, 2.2 GHz  
Векторные инструкции (SVE), аппаратная  
поддержка барьеров...  
Int: 1,2,4,8 байт; Float: 16,32,64 бит

Производительность:  
Пик (теория): 537 Pflop/s  
Тест Linpack: 442 Pflop/s (81%)  
Оперативная память = 5.09 Пбайт  
Энергопотребление = 29.9 МВт  
Площадь = 1920 м<sup>2</sup>



# Суперкомпьютер Frontier, США

(#1 Top500 в 2022 г.)



9 408 вычислительных узлов,  
в каждом узле:  
1 x CPUs (AMD "Trento", 64 ядра, 2GHz)  
4 x GPU (AMD Radeon MI250X)  
8 730 112 ядер

Производительность:  
Пик (теория): **1.68 Eflop/s**  
Тест Linpack: **1.1 Eflop/s** (65%)

Оперативная память = 9.2 PBytes  
HDD = 716 PB (+37 PB на узлах)

21 MW (всего 29 MW) – 52.2 Gflops/Watt  
(1 стойка – 62.68 Gflops/Watt)

#1 – Top500  
#1 – Green500  
#1 – HPL-AI

# Так ли важно, кому доступен этот “Эксафлопс”?

HPC wire

Since 1987 - Covering the Fastest Computers in the World and the People Who Run Them

- Home
- Topics
- Sectors
- Exascale
- Specials
- Resource Library
- Podcast**
- Events
- Solution Channels
- Job Bank
- About
- Subscribe



## US Bars Nvidia and AMD from Selling Top GPUs into China

By Tiffany Trader

September 1, 2022

New trade restrictions levied by the United States against China limit the sale of cutting-edge HPC and AI technologies from Nvidia and AMD to the world's second-largest economy.

In an [SEC filing](#), Nvidia revealed it was prohibited from exporting its A100 and forthcoming H100 GPUs to China and Russia, effective immediately. The stated purpose of the licensing requirements is to prevent “military end use” by these nations.

AMD reported it had also received instructions from U.S. authorities to halt sales of its top GPU chip, the Instinct MI250, to China and Russia. A variant of that chip, the MI250X, powers the U.S. Department of Energy's Frontier supercomputer, which became the [first officially ranked exascale supercomputer](#) earlier this year.

РИА НОВОСТИ



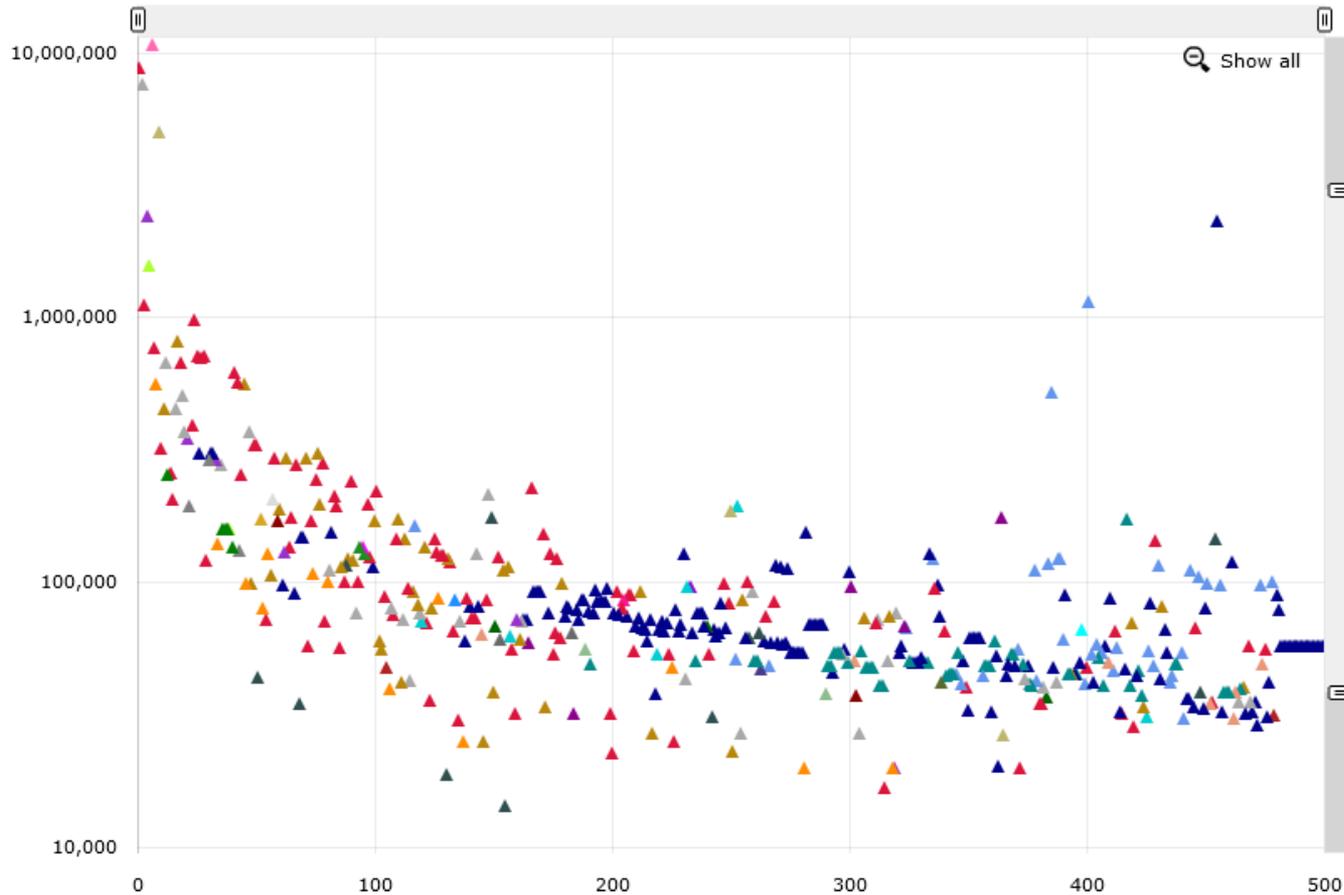
**ВАШИНГТОН, 7 окт – РИА Новости.** США вводят ограничения на поставки 28 китайским компаниям продукции для выпуска суперкомпьютеров и полупроводников, сообщило американское министерство торговли.

# Годы, флопсы и степень параллелизма

(когда и как был достигнут очередной 'X'flops)

$10^6$	Mflops	1964 г.	CDC 6600	10 MHz	1 CPUs
$10^9$	Gflops	1985 г.	Cray 2	125 MHz	8 CPUs
$10^{12}$	Tflops	1997 г.	ASCI Red	200 MHz	9152 CPUs
$10^{15}$	Pflops	2008 г.	Roadrunner	3,2 GHz	122400 Cores
$10^{18}$	Eflops	2022 г.	Frontier	2,0 GHz	8730112 Cores

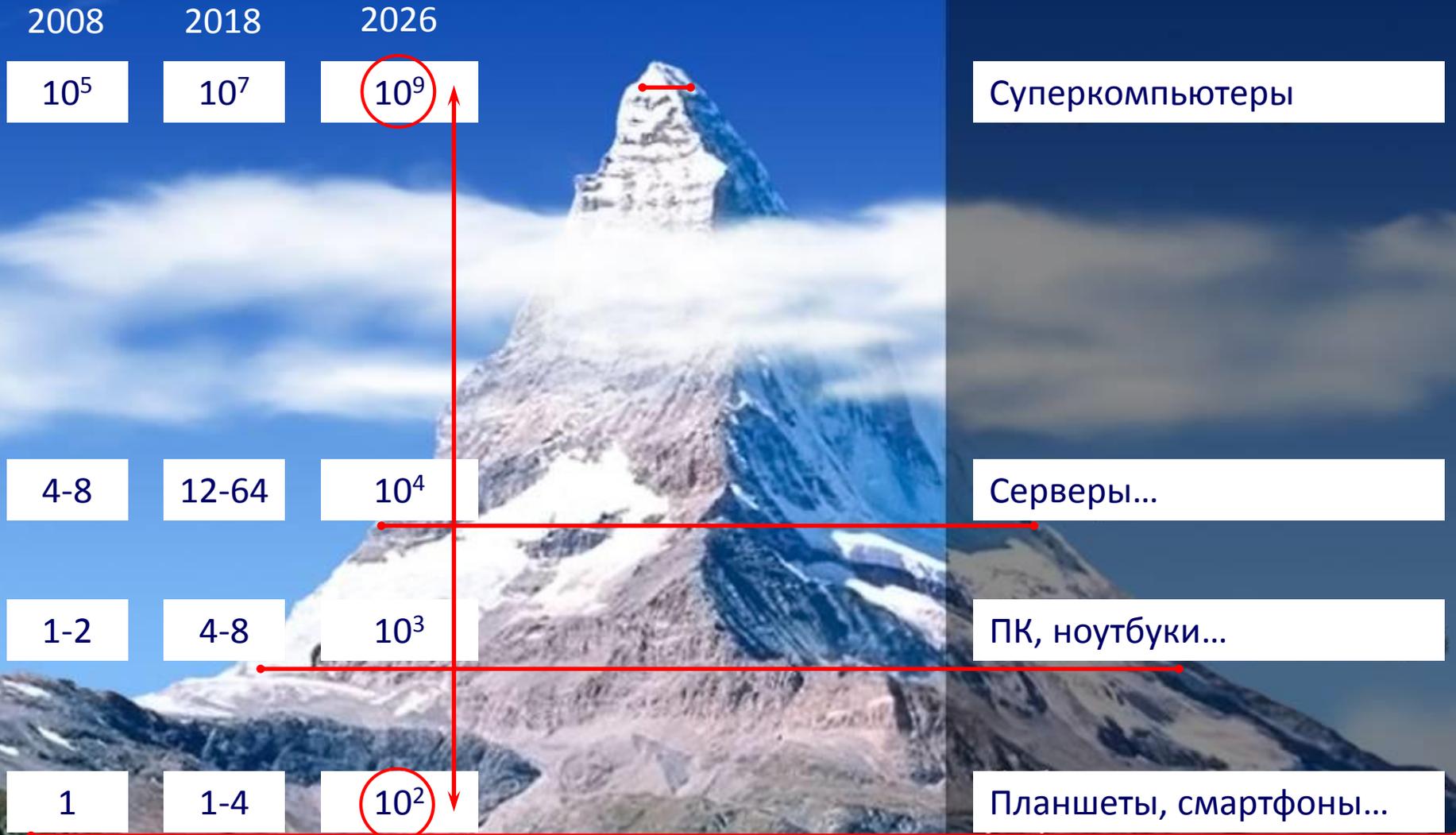
# Число ядер в системах списка Top500 (<http://top500.org>, июнь, 2022 г.)



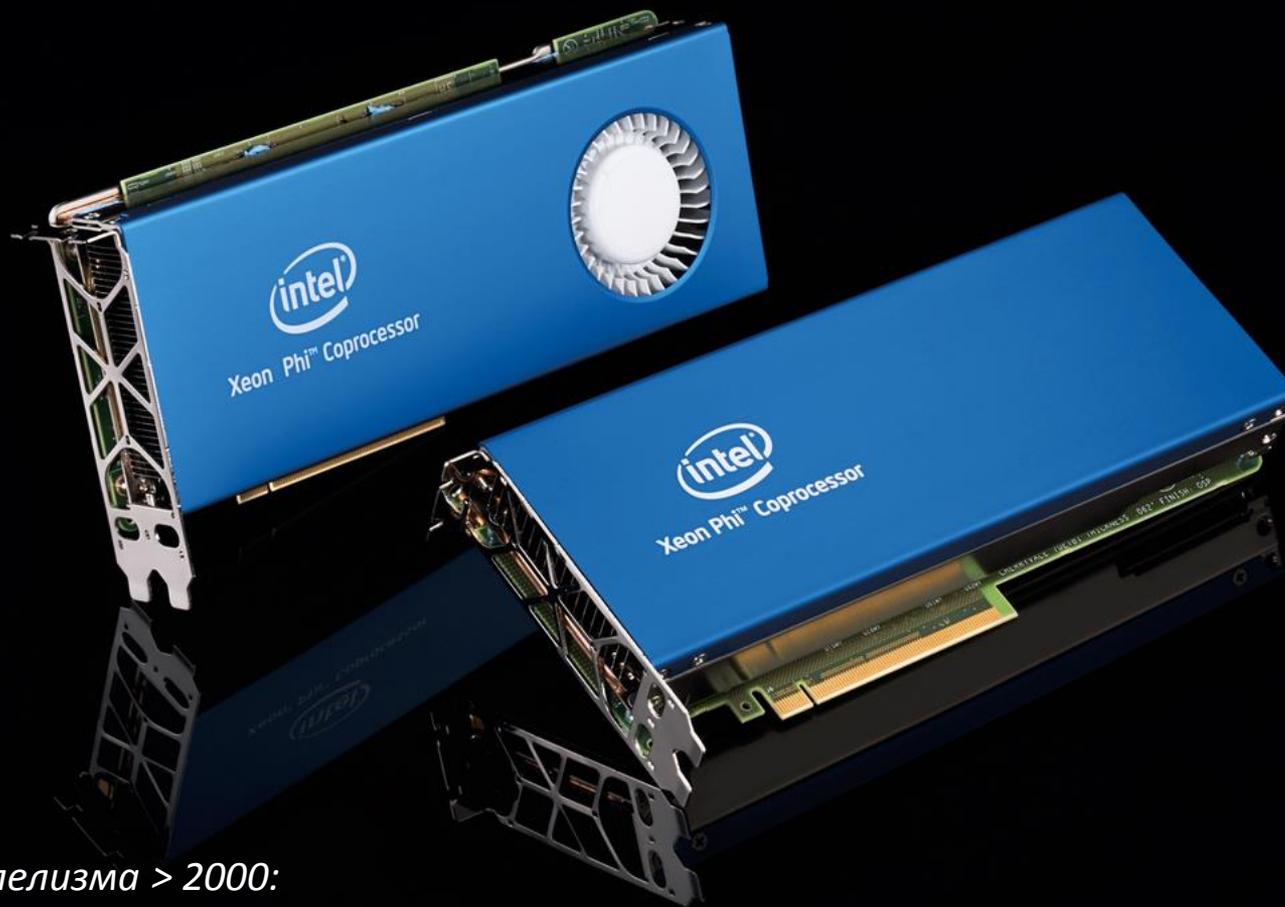
Позиция системы в списке Top500

# Параллельный компьютерный мир

## Степень параллелизма



# Доступный параллелизм: Intel Phi (Knights Landing)

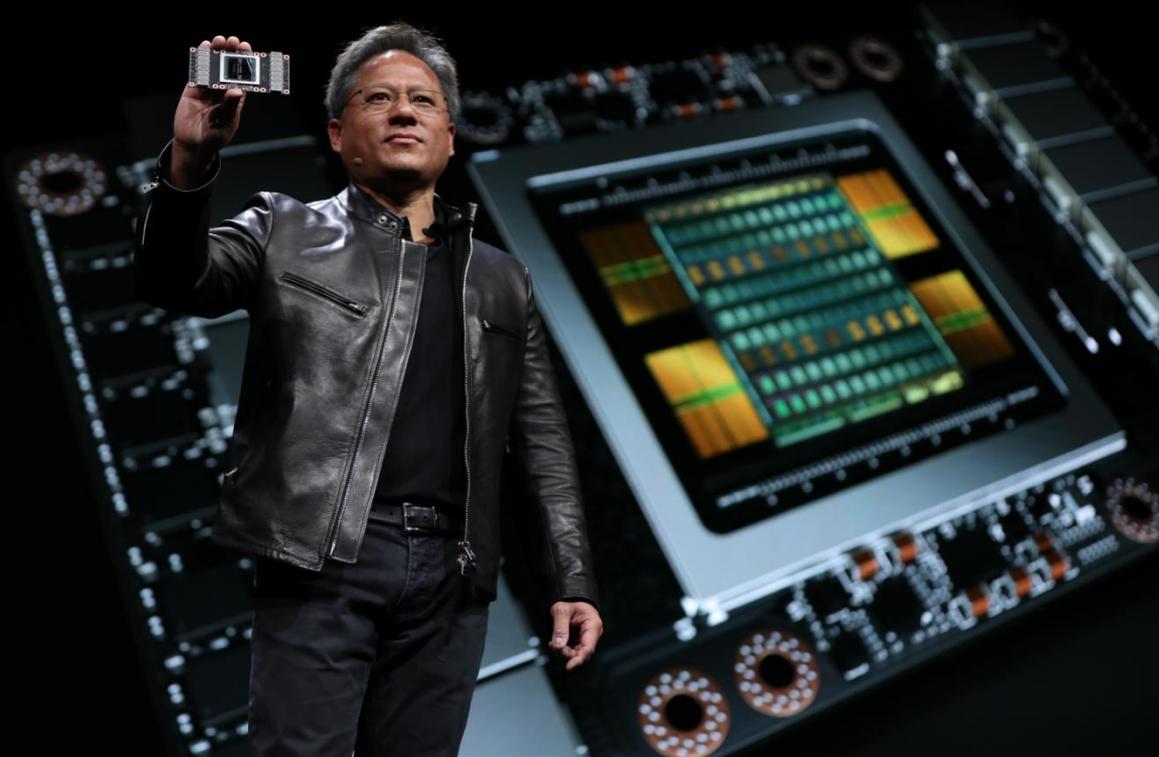


Степень параллелизма > 2000:

- 72 ядра,
- 4 нити на ядро,
- AVX-512 инструкции (8 операций \* 64 разряда)

# *Доступный параллелизм: NVIDIA GPU*

*(Tesla V100, Volta)*



- 5120 ядер,
- 7.5 Тфлопс на двойной точности,
- 15 Тфлопс на одинарной точности,
- 120 Тфлопс (tensor flops, FP16)

# Вычислительные платформы МГУ



5,5 Pflop/s



1,7 Pflop/s

Технологическая основа:  
Intel Xeon 4/6/10/12... ядер  
SMP-узлы

Intel Xeon Phi (KNL)

NVIDIA 2070 / 2090 / K40 / P100 / V100

NVIDIA DGX-2 (V100)

IBM Power 8 / IBM Blue Gene/P

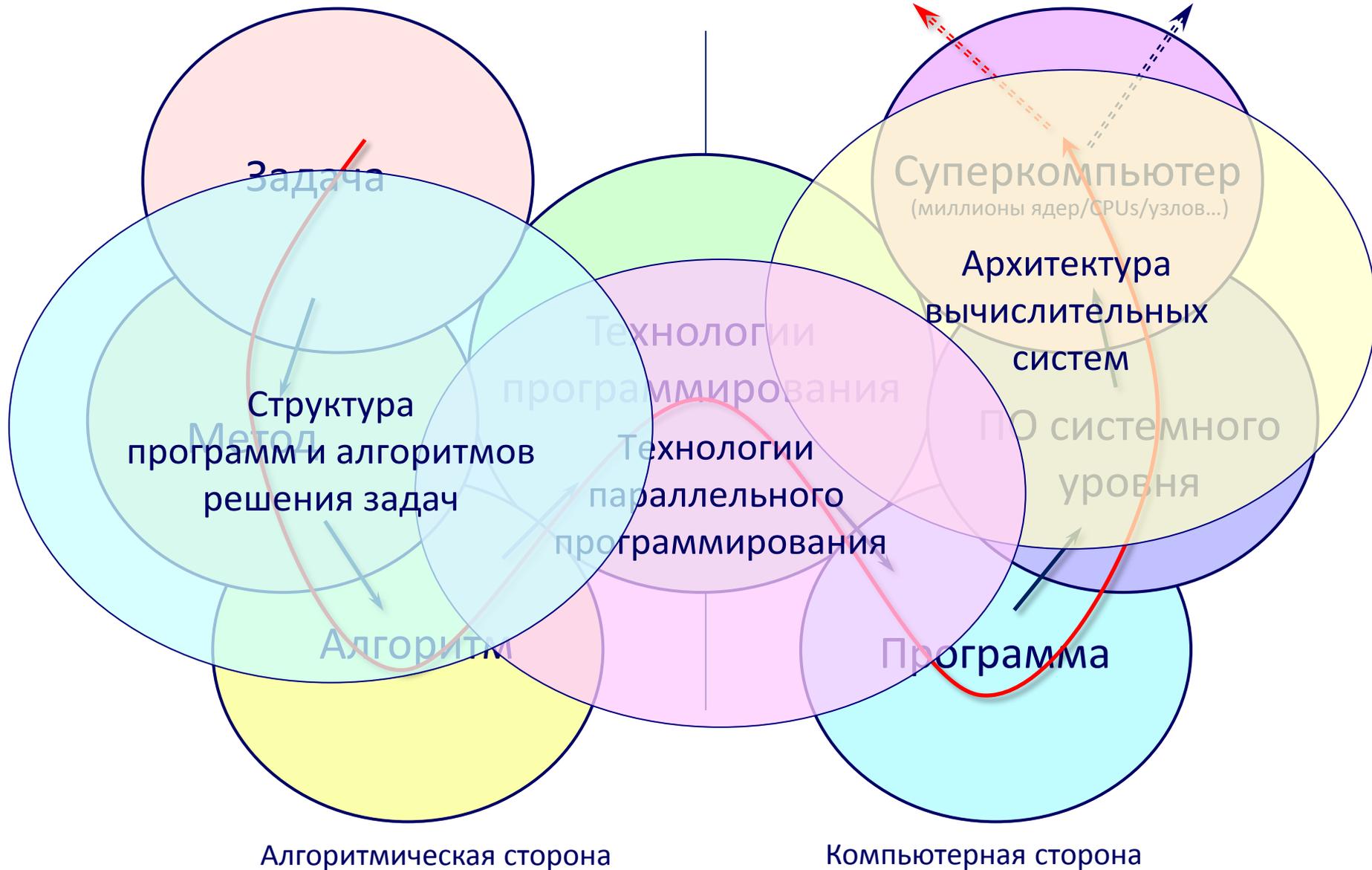
NEC SX-Aurora Tsubasa

Памяти на узел: от 12GB до 2TB

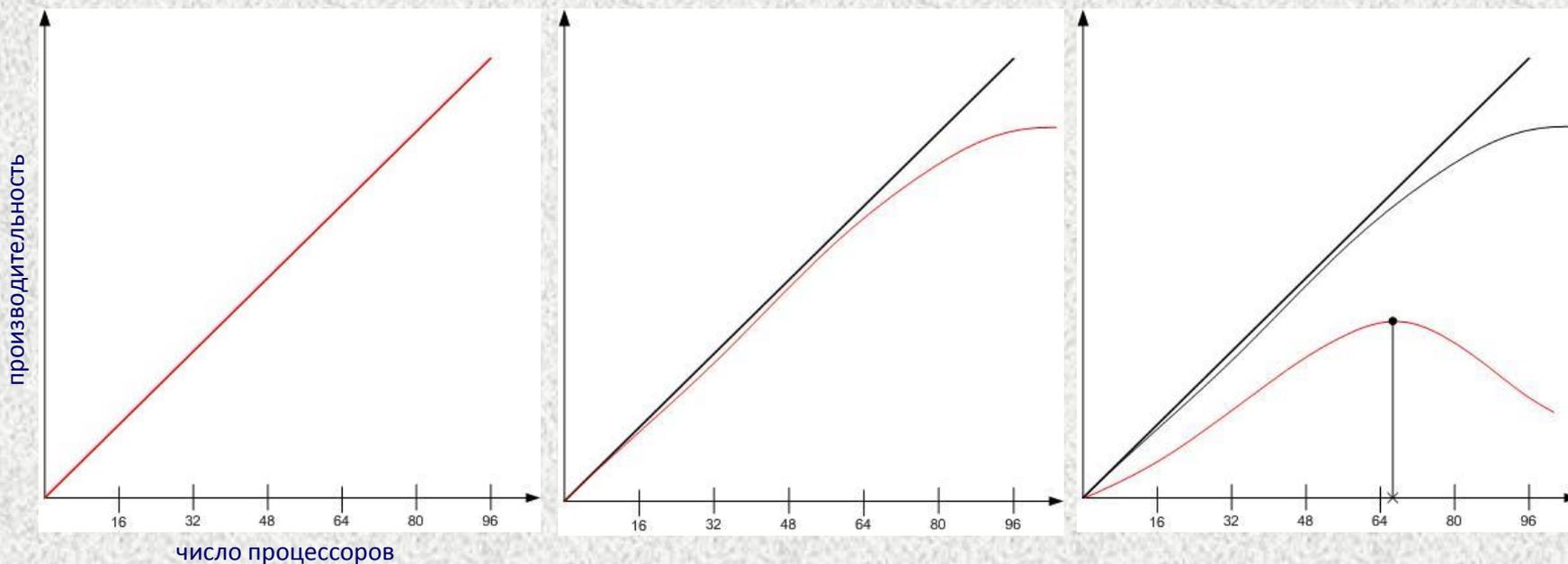
Разнообразие велико,  
параллелизм – везде...

# Решение задач и вычислительные системы

(Реальность) Реальная производительность  $\xleftrightarrow{\text{Огромный разрыв!}}$  (Ожидания) Пиковая производительность



# Масштабируемость параллельных программ и параллельных вычислительных систем (влияют все этапы!)



## Возможные причины снижения масштабируемости:

- Многократное порождение/уничтожение нитей.
- Излишние барьеры для синхронизации работы нитей.
- Неравномерное распределение вычислительной нагрузки.
- Множественные конфликты по адресатам при передаче данных.
- Конечный параллелизм.
- Шум в операционной системе.
- Плохая организация областей вычислений и коммуникаций.
- Излишне мелкая гранулярность при передаче данных.
- Отсутствие привязки нитей к ядрам.
- *и т.д., и т.п. ...*

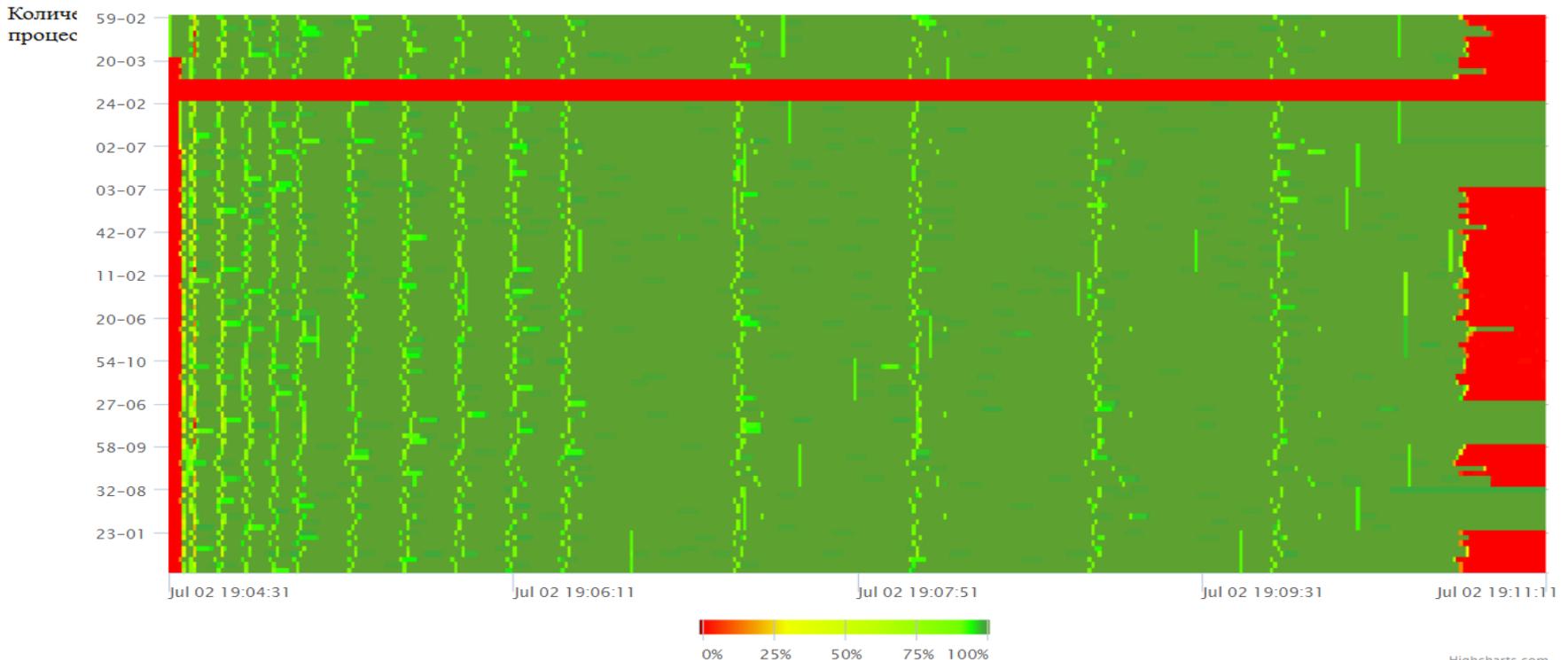
# Тонкий анализ суперкомпьютерных приложений: динамика исполнения

## Информация о задаче № regular-1404302831-496016 пользователя

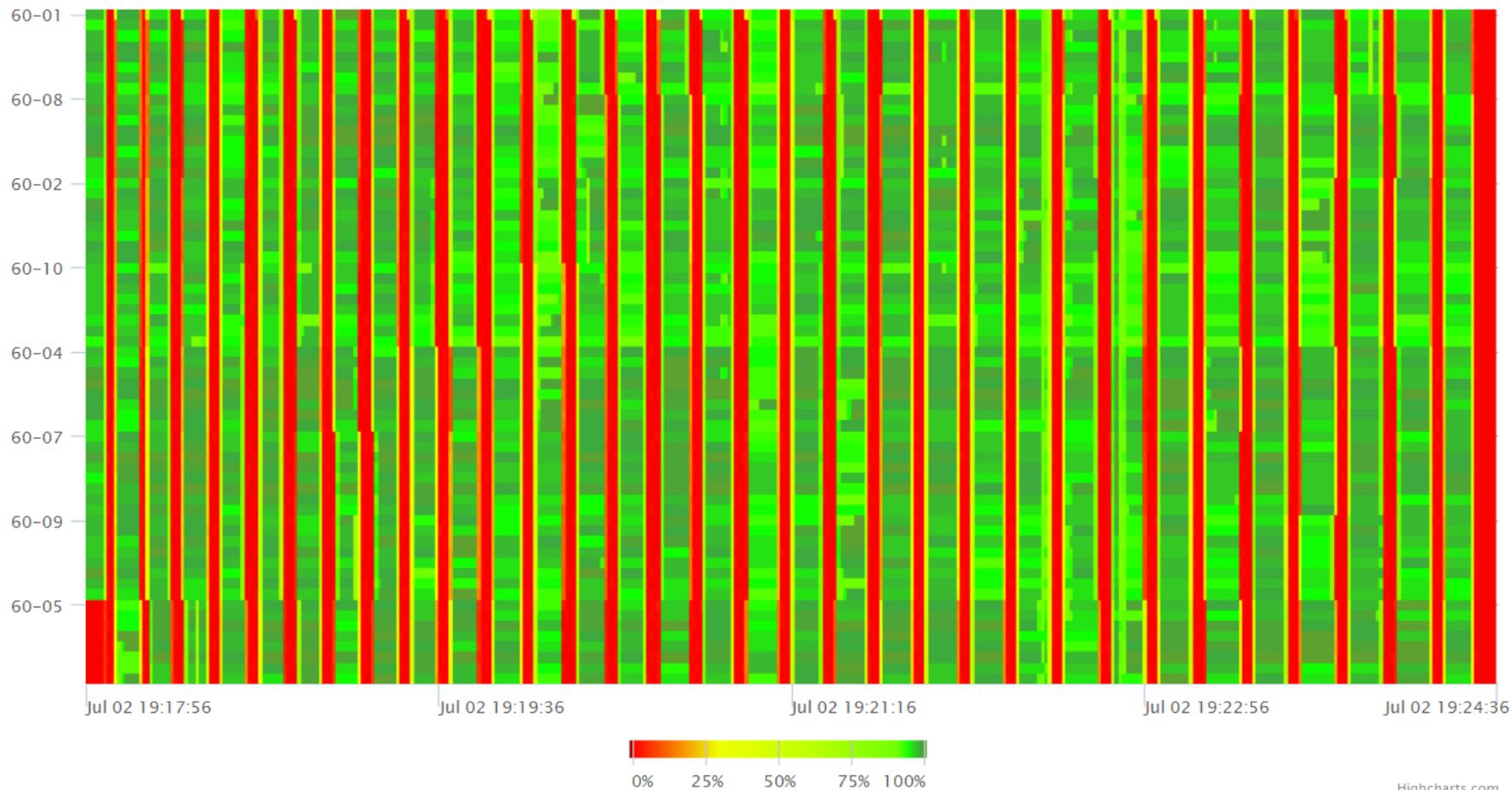
expand all

### Информация о запуске

Строка запуска: ./2dxy\_m01\_p08.ex  
Число ядер: 100  
Номера узлов: node-02-07,node-03-07,node-11-02,node-20-03,node-20-06,node-23-01,node-24-02,node-27-06,node-32-08,node-42-07,node-54-10,node-58-09,node-59-02  
Дата постановки в очередь: Wed, 02 Jul 2014 16:07:11 (1404302831)  
Дата запуска: Wed, 02 Jul 2014 19:04:29 (1404313469)  
Дата окончания счета: Wed, 02 Jul 2014 19:46:13 (1404315973)  
Время счета: 0 days 0 hours 41 minutes 44 seconds  
Время ожидания: 0 days 2 hours 57 minutes 18 seconds



# Тонкий анализ суперкомпьютерных приложений: динамика исполнения



*Хорошо ли мы знаем свойства и особенности  
параллельных алгоритмов ?*

*Должны ли мы думать о параллельных алгоритмах?*

*Да... К сожалению, да...*

---

*Хорошо ли мы знаем статические и динамические свойства  
параллельных программ?*

*Должны ли мы думать о свойствах параллельных программ?*

*Да... К сожалению, да...*

---

*Хорошо ли мы знаем архитектуры параллельных компьютеров ?*

*Должны ли мы думать об архитектурах?*

*Да... К сожалению, да...*

# *Поколения архитектур и парадигмы программирования (или как часто мы были вынуждены полностью переписывать приложения?)*

*С 1976 года до наших дней:*

*70-е – Векторизация циклов*

*80-е – Распараллеливание циклов (внешних) + Векторизация (внутренних)*

*90-е - MPI*

*середина 90-х - OpenMP*

*середина 2000-х - MPI+OpenMP*

*2010-е - CUDA, OpenCL, MPI+OpenMP+ускорители (GPU, Xeon Phi)*

*...*

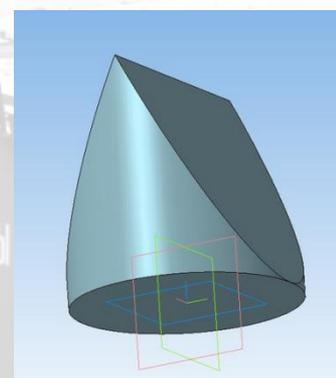
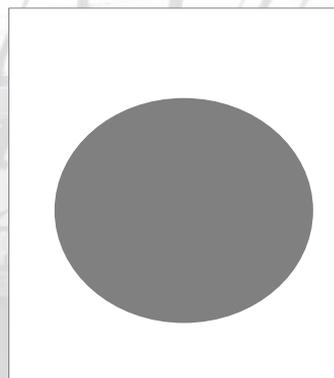
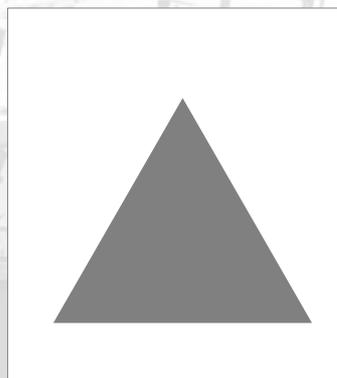
***Изменения в архитектуре компьютеров не меняют алгоритмов! Но:***

*Для каждого поколения компьютеров мы вынуждены:*

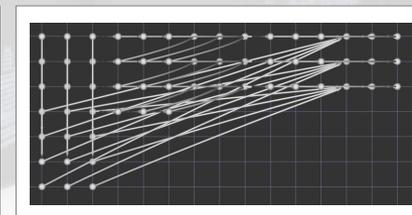
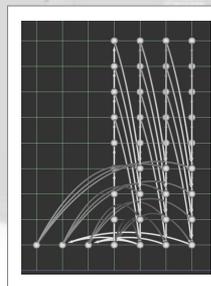
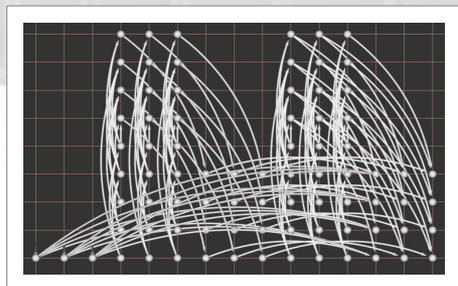
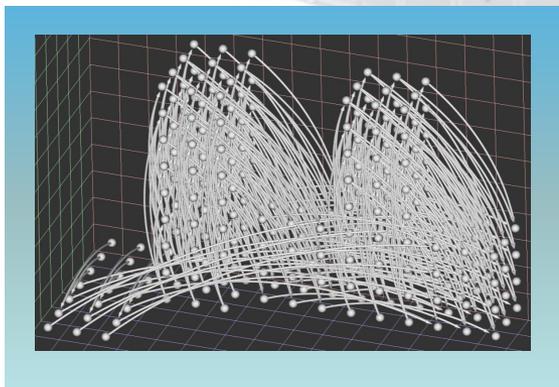
- Анализировать алгоритмы, чтобы понять, как их приспособить под новую компьютерную платформу ;*
- Описывать найденные свойства, чтобы получить эффективную реализацию для новой платформы.*

# Изменения в архитектуре компьютеров не меняют алгоритмов!

Эти фигуры разные?



Каковы способы представления этого алгоритма?



...

# Поколения архитектур и парадигмы программирования (или как часто мы были вынуждены полностью переписывать приложения?)

С 1976 года до наших дней:

70-е – Векторизация циклов

80-е – Распараллеливание циклов (внешних) + Векторизация (внутренних)

90-е - MPI

середина 90-х - OpenMP

середина 2000-х - MPI+OpenMP

2010-е - CUDA, OpenCL, MPI+OpenMP+ускорители (GPU, Xeon Phi)

...

Можно ли  
выполнить  
такой анализ  
“раз и навсегда” ?

**Изменения в архитектуре компьютеров не меняют алгоритмов!** Но:

Для каждого поколения компьютеров мы вынуждены:

- Анализировать алгоритмы, чтобы понять, как их приспособить под новую компьютерную платформу ;
- Описывать найденные свойства, чтобы получить эффективную реализацию для новой платформы.

*Что значит “выполнить анализ алгоритма”?*

*Что мы должны найти в алгоритмах?*

*“...выполнить анализ раз и навсегда...” – как записать результаты?*

*Что представляет “единое” / “универсальное” описание алгоритмов?*

*Какие свойства алгоритмов нужно исследовать и описать чтобы получать эффективные реализации в будущем для будущих платформ?*

*Слишком много “простых” вопросов...*

# Описание алгоритмов (на примере *разложения Холецкого*)

Кратко о важном

## 1 Свойства и структура алгоритма

### 1.1 Общее описание алгоритма

**Разложение Холецкого** впервые предложено французским офицером и математиком Андре-Луи Холецким в конце Первой Мировой войны, незадолго до его гибели в бою в августе 1918 г. Идея этого разложения была опубликована в 1924 г. его сослуживцем. Потом оно было использовано поляком Т. Банашевичем в 1938 г. В советской математической литературе называется также методом квадратного корня [1-3]; название связано с характерными операциями, отсутствующими в родственном разложении Гаусса.

Первоначально разложение Холецкого использовалось исключительно для плотных симметричных положительно определенных матриц. В настоящее время его использование гораздо шире. Оно может быть применено также, например, к эрмитовым матрицам. Для повышения производительности вычислений часто применяется блочная версия разложения.

Для разреженных матриц разложение Холецкого также широко применяется в качестве основного этапа прямого метода решения линейных систем. В этом случае используют специальные упорядочивания для уменьшения ширины профиля исключения, а следовательно и уменьшения количества арифметических операций. Другие упорядочивания используются для выделения независимых блоков вычислений при работе на системах с параллельной организацией.

### 1.2 Математическое описание алгоритма

Исходные данные: положительно определённая симметрическая матрица  $A$  (элементы  $a_{ij}$ ).

Вычисляемые данные: нижняя треугольная матрица  $L$  (элементы  $l_{ij}$ ).

Формулы метода:

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii}}$$

#### Свойства алгоритма:

- Последовательная сложность алгоритма:  $O(n^3)$
- Высота ярусно-параллельной формы:  $O(n)$
- Ширина ярусно-параллельной формы:  $O(n^2)$
- Объём входных данных:  $\frac{n(n+1)}{2}$
- Объём выходных данных:  $\frac{n(n+1)}{2}$

# Описание алгоритмов (на примере разложения Холецкого)

## Общее описание

For positive definite Hermitian matrices (*symmetric matrices in the real case*), we use the decomposition  $A = LL^*$ , where  $L$  is the *lower triangular matrix*, or the decomposition  $A = U^*U$ , where  $U$  is the *upper triangular matrix*. These forms of the Cholesky decomposition are equivalent in the sense of the amount of arithmetic operations and are different in the sense of data representation. The essence of this decomposition consists in the implementation of formulas obtained uniquely for the elements of the matrix  $L$  from the above equality. The Cholesky decomposition is widely used due to the following features.

## Математическое описание

Input data: a symmetric positive definite matrix  $A$  whose elements are denoted by  $a_{ij}$ .

Output data: the lower triangular matrix  $L$  whose elements are denoted by  $l_{ij}$ .

The Cholesky algorithm can be represented in the form

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}},$$

$$l_{j1} = \frac{a_{j1}}{l_{11}}, \quad j \in [2, n],$$

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip}^2}, \quad i \in [2, n],$$

$$l_{ji} = \left( a_{ji} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} l_{jp} \right) / l_{ii}, \quad i \in [2, n-1], j \in [i+1, n].$$

## Комментарии к алгоритму

The Cholesky decomposition allows one to use the so-called *accumulation mode* due to the fact that the significant part of computation involves *dot product operations*. Hence, these dot products can be accumulated in double precision for additional accuracy. In this mode, the Cholesky method has the least *equivalent perturbation*. During the process of decomposition, no growth of the matrix elements can occur, since the matrix is symmetric and positive definite. Thus, the Cholesky algorithm is unconditionally stable.

# Описание алгоритмов (на примере *разложения Холецкого*)

## Вычислительное ядро

A computational kernel of its serial version can be composed of  $\frac{n(n-1)}{2}$  dot products of the matrix rows:

$$\sum_{p=1}^{i-1} l_{ip}l_{jp}$$

Операции чтения/записи крайне важны!

## Последовательная сложность

The following number of operations should be performed to decompose a matrix of order  $n$  using a serial version of the Cholesky algorithm:

- $n$  square roots,
- $\frac{n(n-1)}{2}$  divisions,
- $\frac{n^3-n}{6}$  multiplications and  $\frac{n^3-n}{6}$  additions (subtractions): the main amount of computational work.

Операции чтения/записи крайне важны!

## Базовая схема реализации

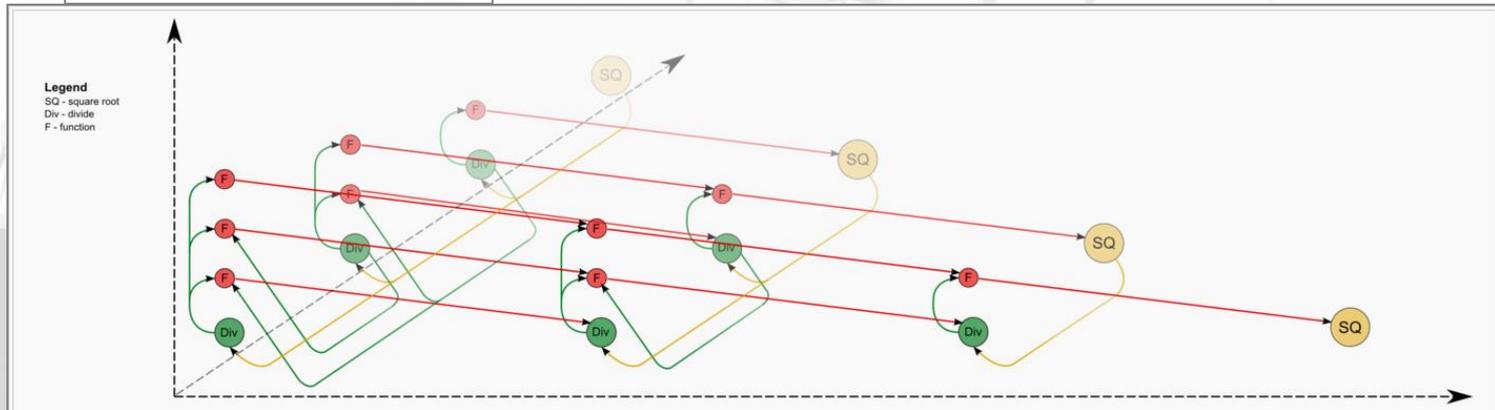
```
DO I = 1, N
  S = A(I,I)
  DO IP=1, I-1
    S = S - DPROD(A(I,IP), A(I,IP))
  END DO
  A(I,I) = SQRT(S)
  DO J = I+1, N
    S = A(J,I)
    DO IP=1, I-1
      S = S - DPROD(A(I,IP), A(J,IP))
    END DO
    A(J,I) = S/A(I,I)
  END DO
END DO
```

## Дополнительная информация

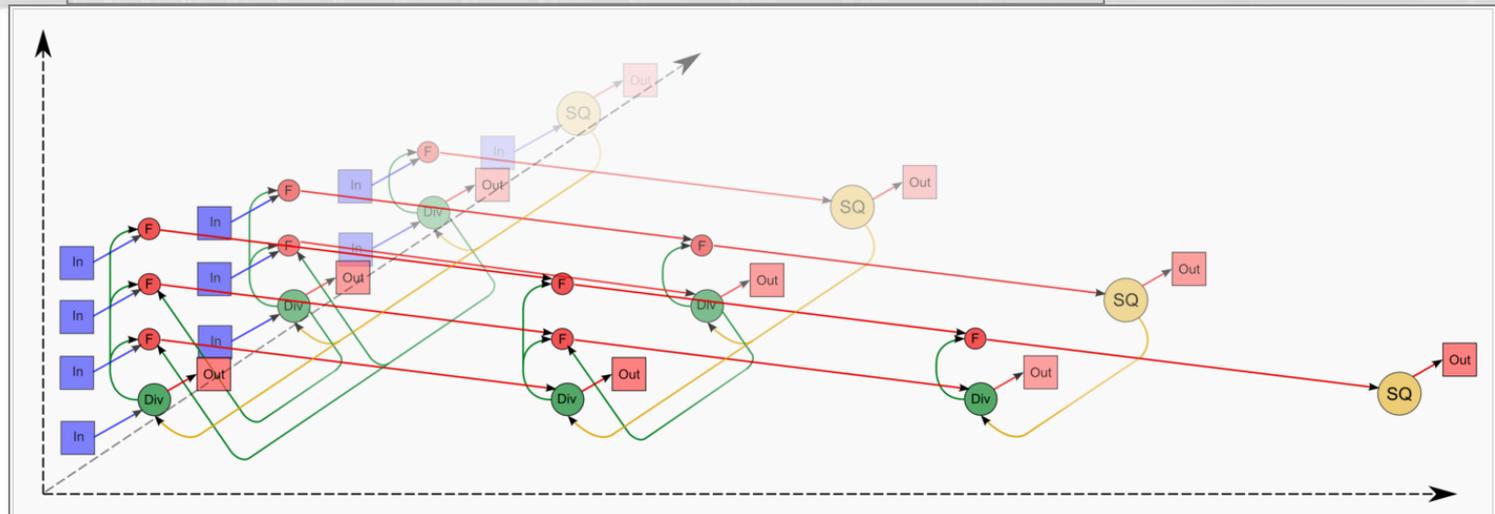
There exist block versions of this algorithm;

# Описание алгоритмов (на примере *разложения Холецкого*)

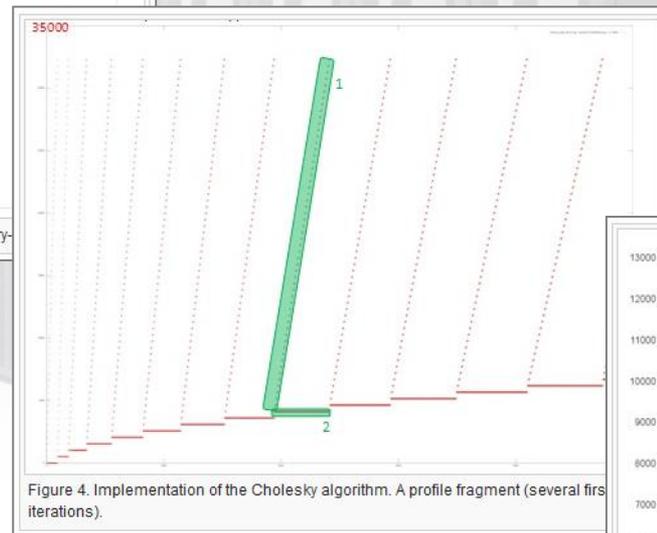
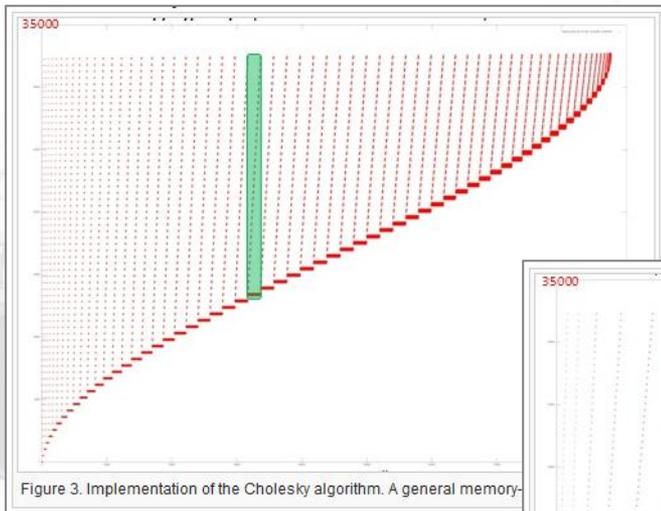
Информационная структура



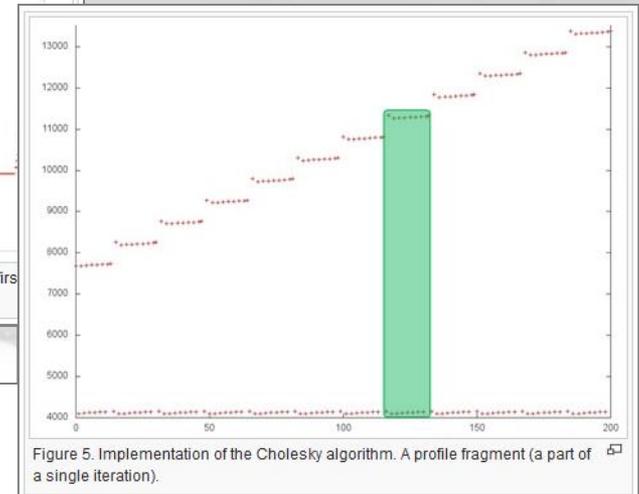
Информационная структура с указанием входных и выходных данных



# Описание алгоритмов (на примере *разложения Холецкого*)

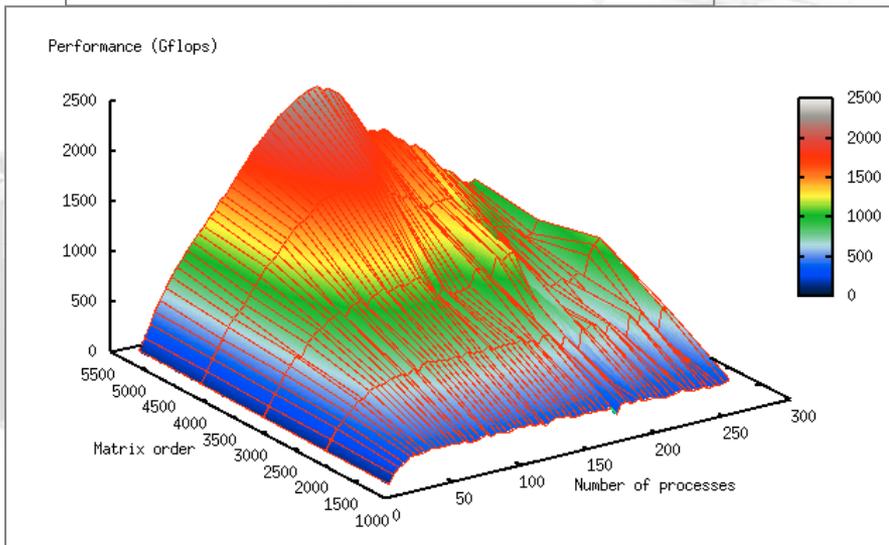


Локальность данных (профиль работы с памятью)

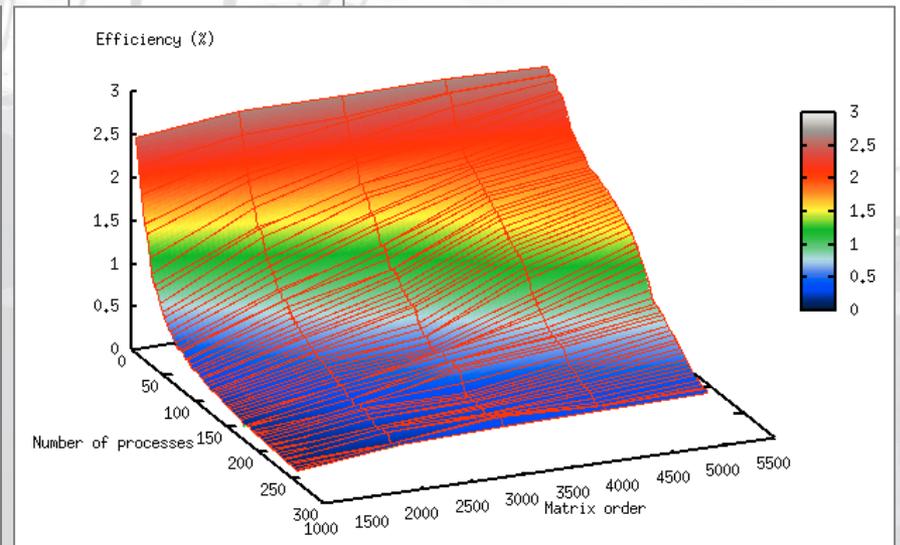


# Описание алгоритмов (на примере *разложения Холецкого*)

Масштабируемость (производительность) \*

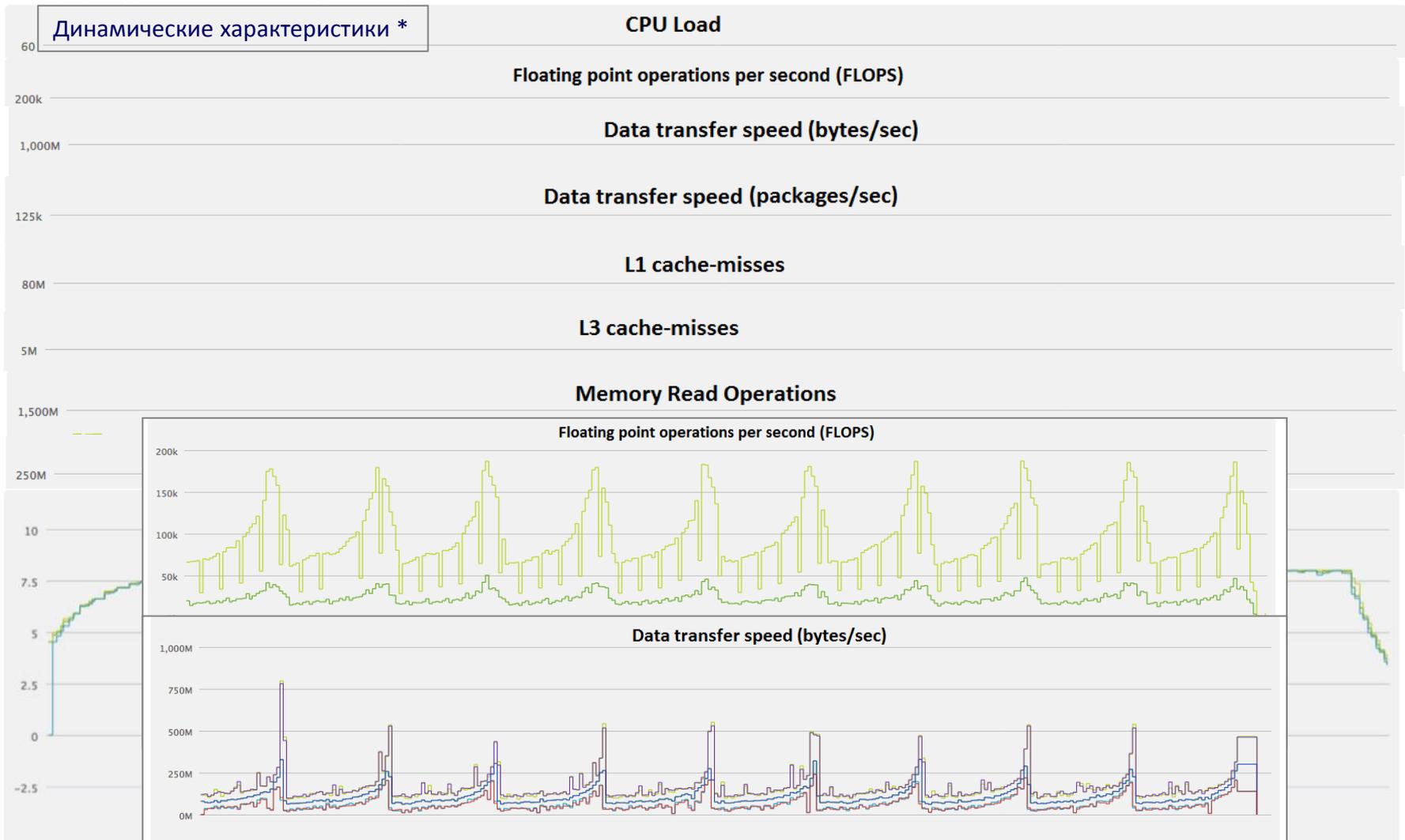


Эффективность \*



\* Масштабируемость, производительность, эффективность измерялись на суперкомпьютере МГУ "Ломоносов".

# Описание алгоритмов (на примере *разложения Холецкого*)



\* Динамические характеристики получены на суперкомпьютере МГУ "Ломоносов".

*Это очень полезная информация об алгоритме,  
она действительно нужна.*

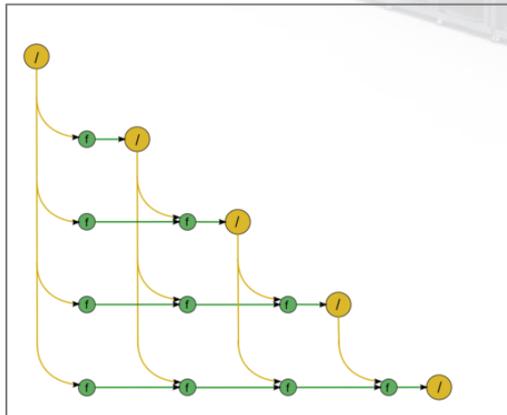
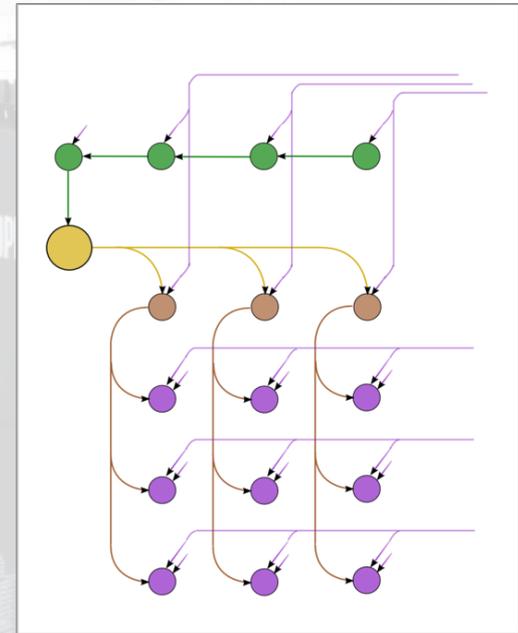
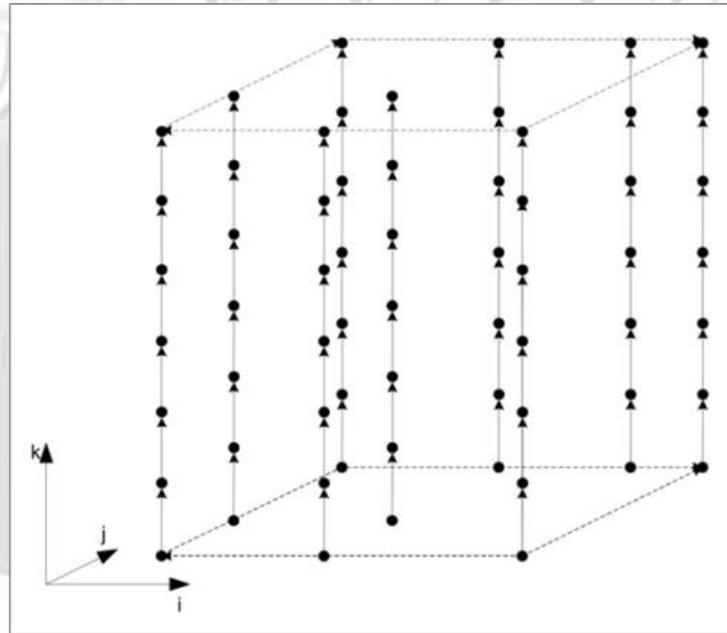
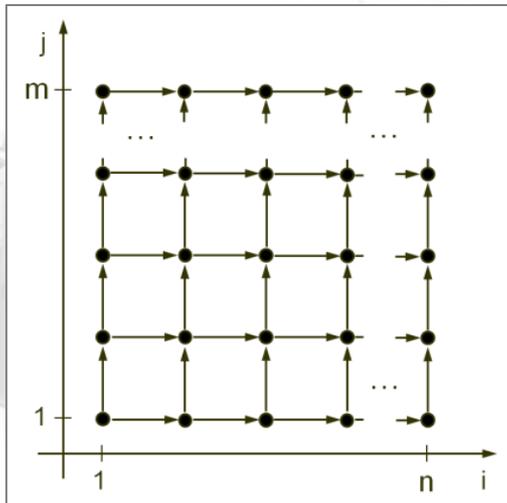
*Но...*

*В процессе создания полного описания алгоритма  
возникает не просто много проблем.*

*Возникает очень много сложных проблем !*

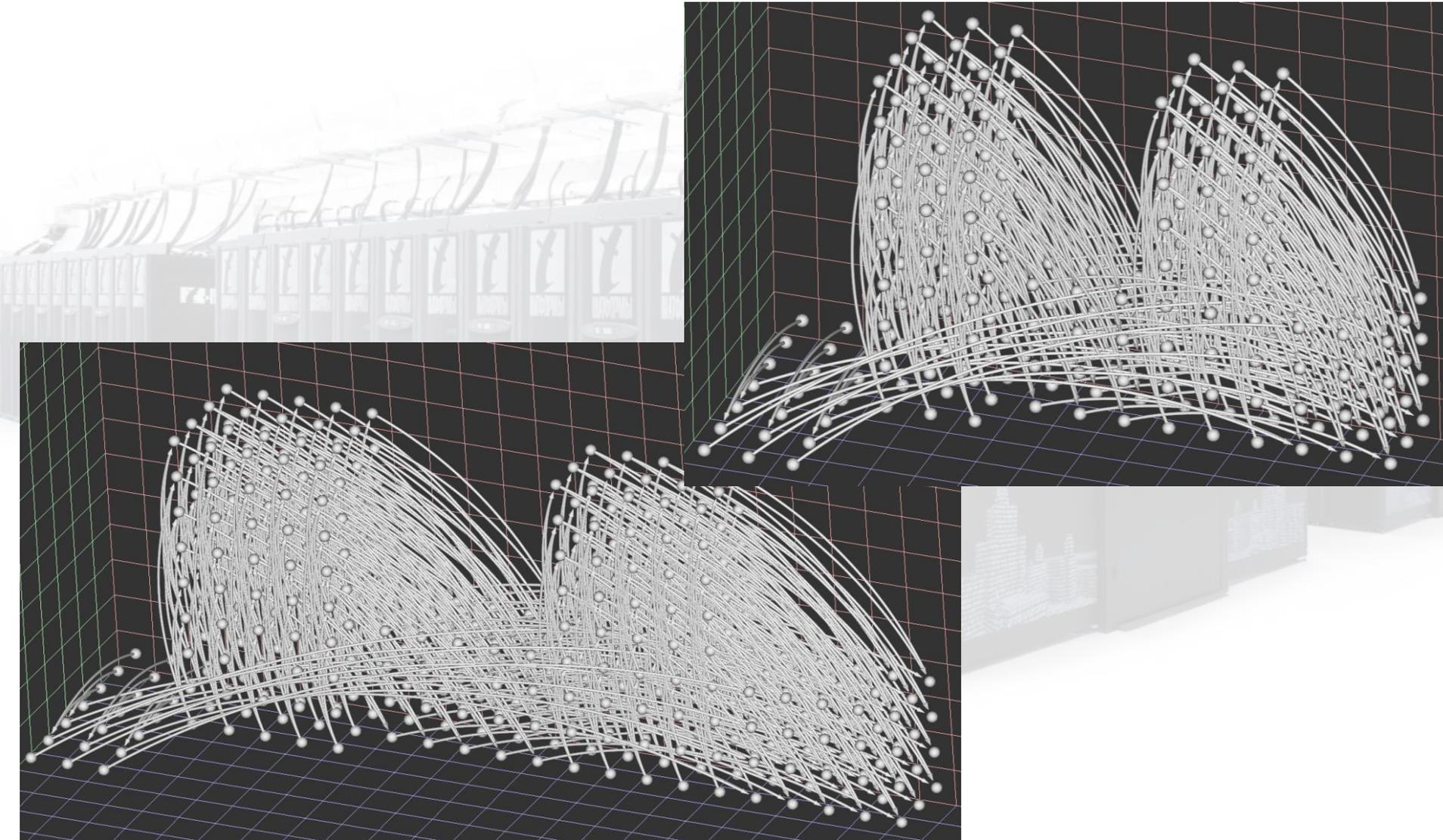
# Информационная структура: как получать, описывать, показывать... ?

(сложности описания алгоритмов)

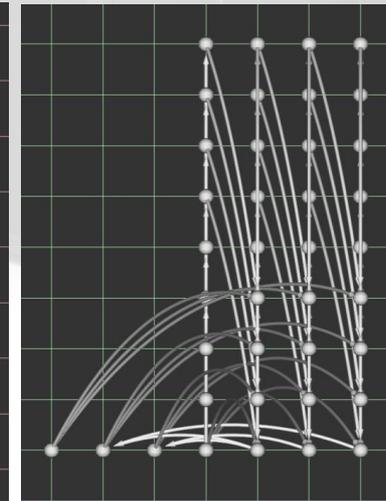
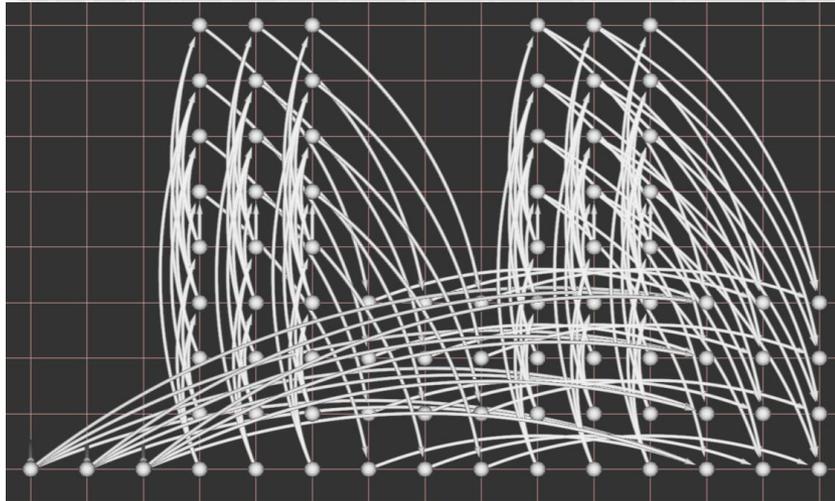
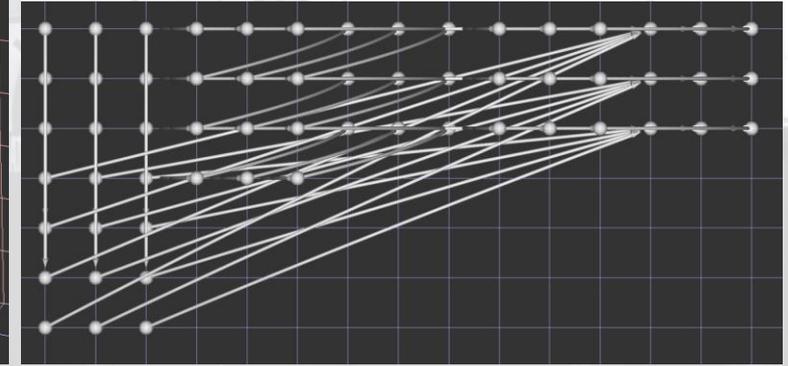
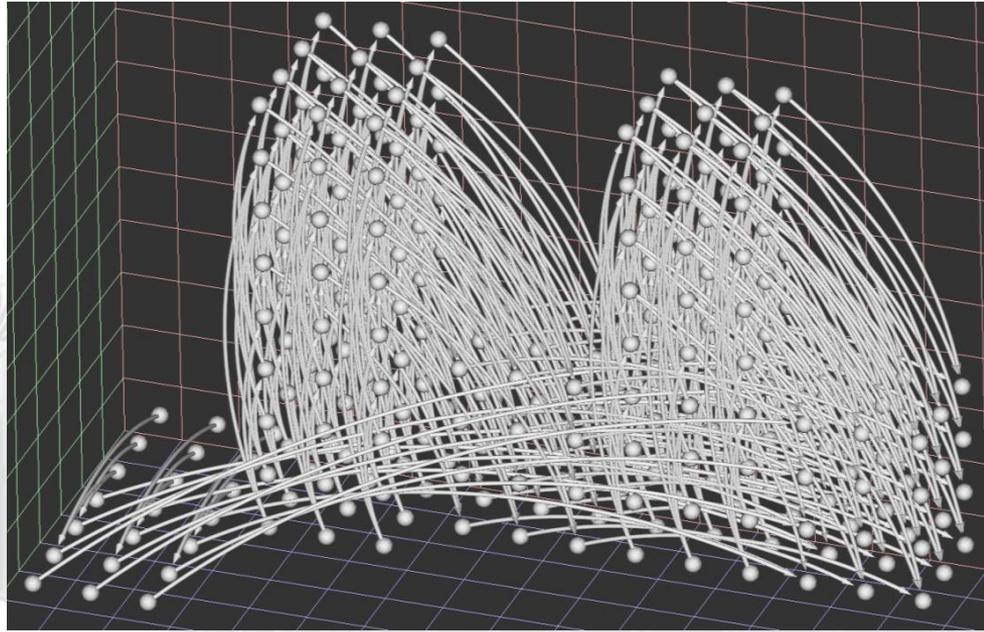


- Как изобразить потенциально бесконечный граф ?
- Как изобразить потенциально многомерный граф ?
- Как показать зависимость структуры графа от размера задачи ?

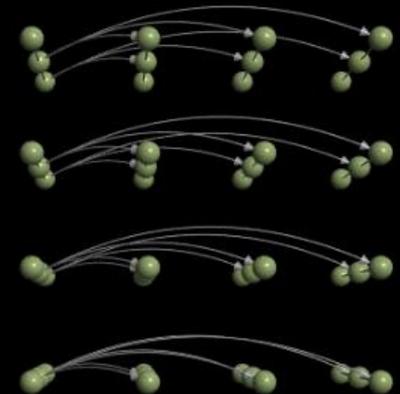
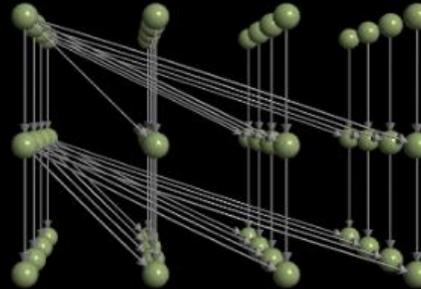
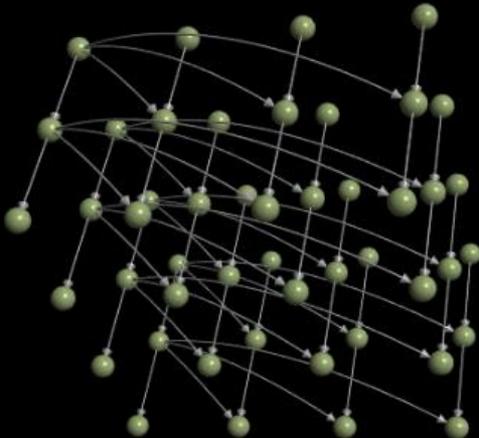
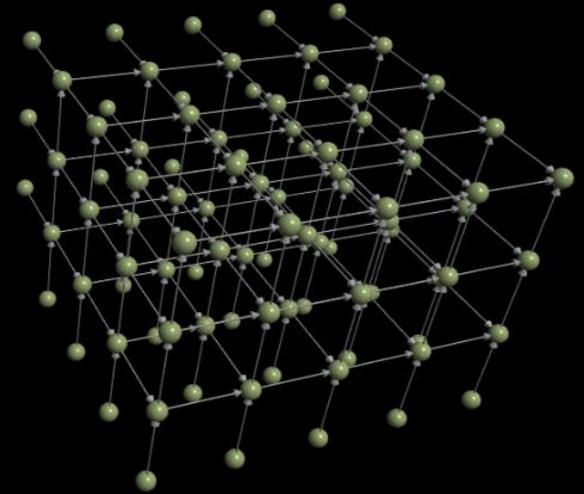
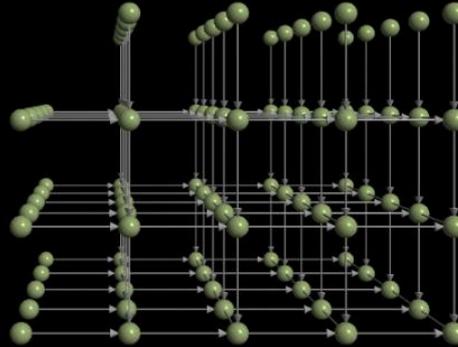
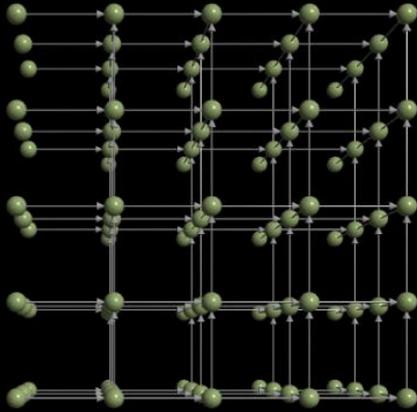
# Информационная структура: как получить, описывать, показывать... ? (сложности описания алгоритмов)



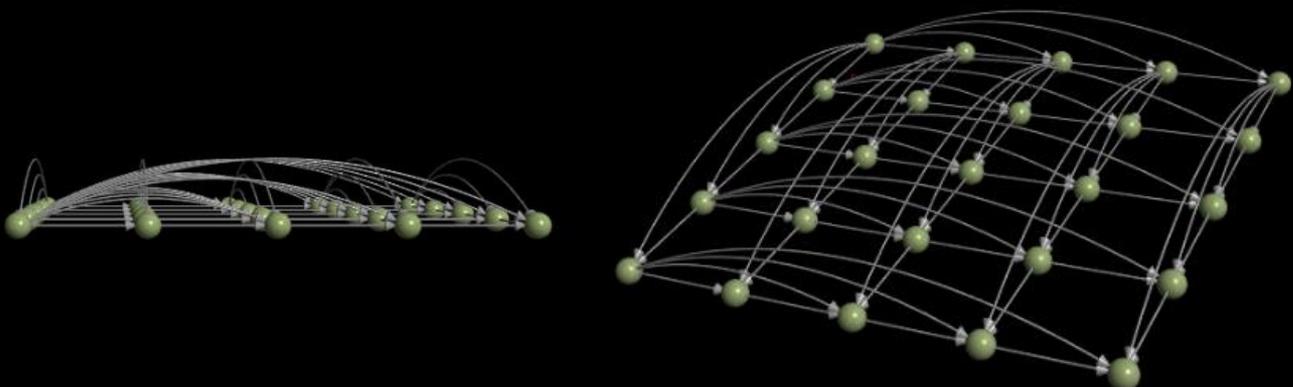
# Информационная структура: как получить, описывать, показывать... ? (сложности описания алгоритмов)



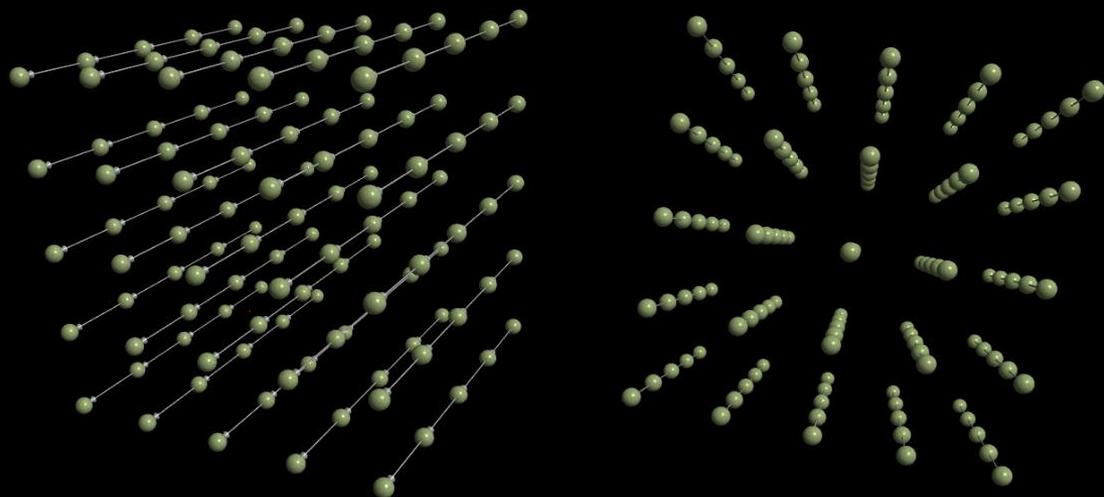
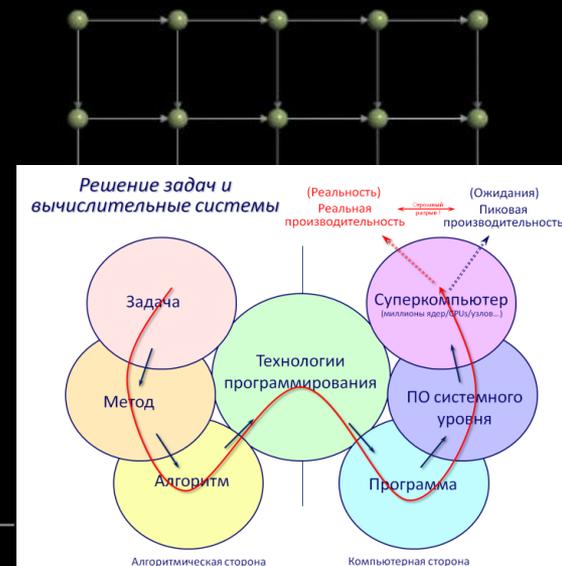
# *Информационная структура алгоритмов и программ*



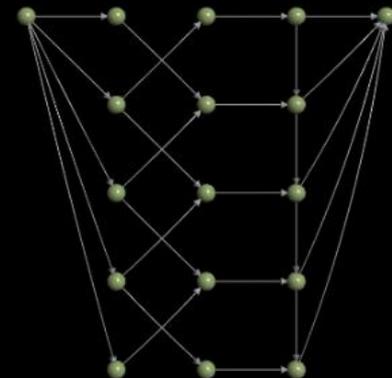
# Информационная структура алгоритмов и программ



Типовые алгоритмические структуры



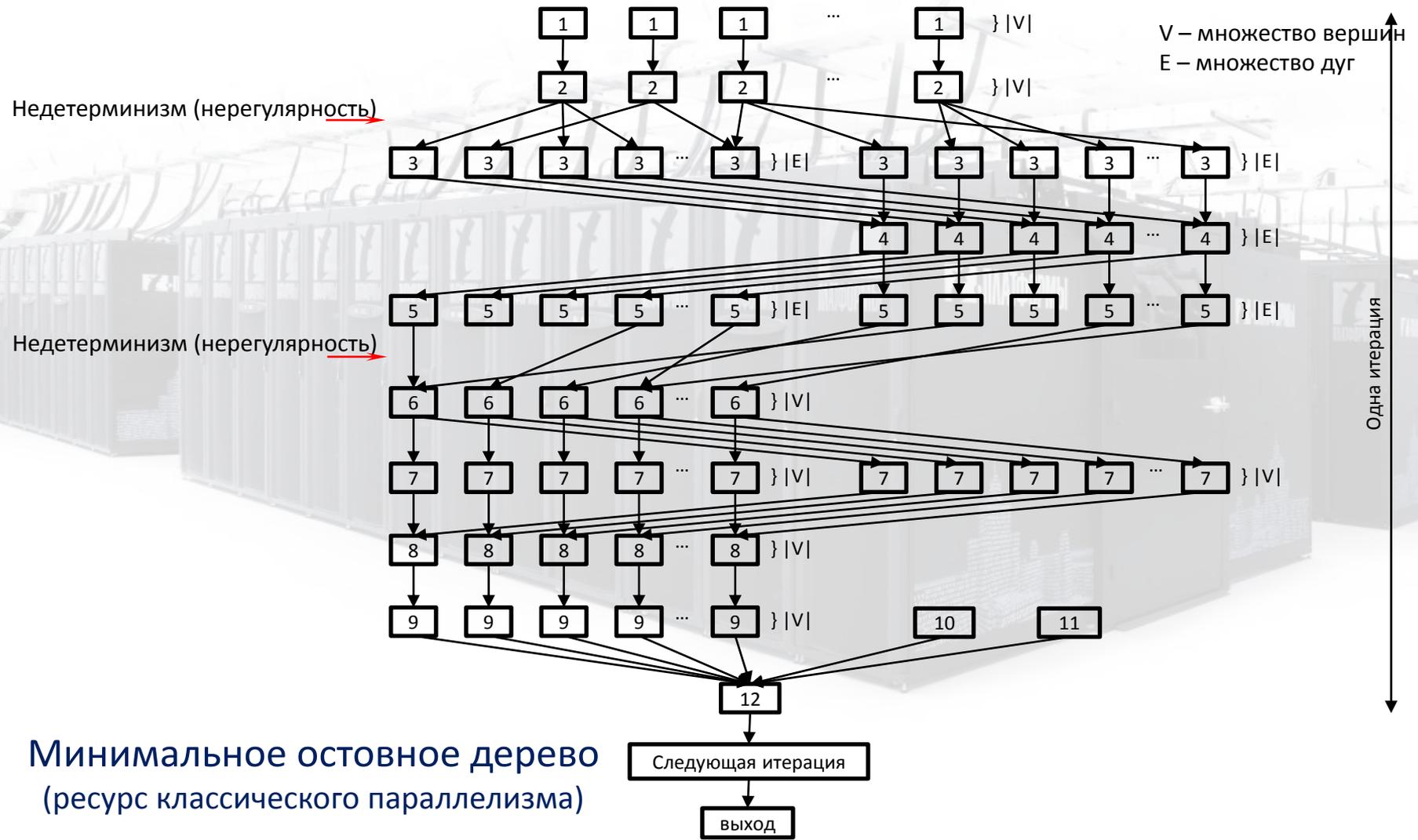
Огромный ресурс параллелизма



А такой структуры быть не может ...

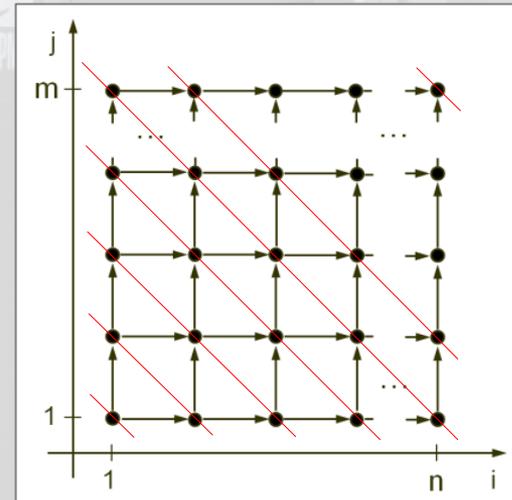
# Потенциальный параллелизм: как находить, описывать, показывать... ?

(сложности описания алгоритмов)



# *Возможные источники несбалансированности: это важно, это нужно отметить (сложности описания алгоритмов)*

- Баланс между арифметическими операциями  $+/-$  and  $*$  ;
- Баланс между арифметическими операциями и “чтениями/записями”;
- Баланс в числе операций, которые могут выполняться параллельно;



- Баланс между вычислительной и коммуникационной частями...

# *Возможные источники недетерминизма: это важно, это нужно отметить (сложности описания алгоритмов)*

- Структура входных данных (разреженные матрицы, графы произвольной структуры...);
  - Итерационная природа алгоритмов;
  - Датчики случайных чисел;
  - Отсутствие повторяемости результатов из-за разного порядка выполнения ассоциативных операций...
- 

# Структура и свойства алгоритмов

Да, можно: проект AlgoWiki

<http://AlgoWiki-Project.org/>

Можно ли  
выполнить  
такой анализ  
“раз и навсегда” ?

- Анализировать алгоритмы, чтобы понять, как их приспособить под новую компьютерную платформу ;

# Структура и свойства алгоритмов

(от мобильных платформ до экзафлопсных суперкомпьютеров)

Информационный граф    Детерминированность  
Вычислительное ядро    Макроструктура    Локальность вычислений  
Алгоритмы:    Масштабируемость    Локальность данных  
теоретический потенциал    Специфика и особенности    Математическое описание  
(машинно-независимые свойства)    Эффективность  
Сложность    Коммуникационный профиль    Эффективность  
Ресурс параллелизма    Вычислительная мощность  
Входные / Выходные данные

**AlgoWiki**

<http://AlgoWiki-Project.org>

Файл Правка Вид Журнал Закладки Инструменты Справка

Алговики

algowiki-project.org/ru/Открытая\_энциклопедия\_свойств\_алгоритмов

Поиск

Войти Запрос учётной записи

Читать Просмотр История Поиск



Заглавная страница  
Общий форум  
Технический форум  
Справка  
Свежие правки

Хранилище файлов  
Новые файлы  
Загрузить файл

Инструменты  
Ссылки сюда  
Связанные правки  
Спецстраницы  
Версия для печати  
Постоянная ссылка  
Сведения о странице

На других языках  
English

## Открытая энциклопедия свойств алгоритмов

↑

**Добро пожаловать! Присоединяйтесь!**

**AlgoWiki** - это открытая энциклопедия по **свойствам алгоритмов и особенностям их реализации** на различных программно-аппаратных платформах от мобильных платформ до экзафлопсных суперкомпьютерных систем с возможностью коллективной работы всего мирового вычислительного сообщества.

Цель **AlgoWiki** - дать исчерпывающее описание алгоритма, которое поможет оценить его потенциал применительно к конкретной параллельной вычислительной платформе. Кроме классических свойств алгоритмов, например, **последовательной сложности**, в AlgoWiki представлены дополнительные сведения, составляющие в совокупности полную картину об алгоритме: **параллельная сложность**, параллельная структура, **детерминированность**, оценки **локальности данных**, **эффективность** и **масштабируемость**, коммуникационный профиль конкретных реализаций и многие другие.

Читать подробнее: [О проекте](#)

**Структура проекта**

Классификация алгоритмов - основной раздел AlgoWiki, содержащий описания всех алгоритмов. Алгоритмы добавляются в подходящий раздел классификации, при необходимости классификация расширяется за счет новых разделов.

**Образцовая статья**

### Разложение Холецкого (метод квадратного корня)

**1 Свойства и структура алгоритма**

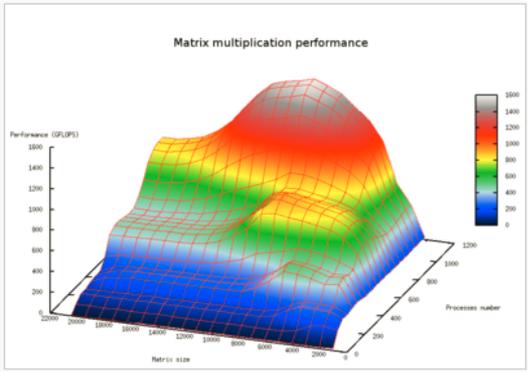
**1.1 Общее описание алгоритма**

**Свойства алгоритма:**

- Последовательная сложность алгоритма:  $O(n^3)$

↓

**Изображение дня**



Производительность умножения плотных матриц

**Организация работы**

- Структура описания свойств алгоритмов
- Руководства по заполнению разделов описания
- Готовность статей
- Результаты прогона алгоритмов
- Глоссарий
- Помощь

**Участники проекта**

# Описание алгоритмов в AlgoWiki (предопределенная структура)

## Содержание [убрать]

- 1 Свойства и структура алгоритмов
  - 1.1 Общее описание алгоритма
  - 1.2 Математическое описание алгоритма
  - 1.3 Вычислительное ядро алгоритма
  - 1.4 Макроструктура алгоритма
  - 1.5 Схема реализации последовательного алгоритма
  - 1.6 Последовательная сложность алгоритма
  - 1.7 Информационный граф
  - 1.8 Ресурс параллелизма алгоритма
  - 1.9 Входные и выходные данные алгоритма
  - 1.10 Свойства алгоритма
- 2 Программная реализация алгоритма
  - 2.1 Особенности реализации последовательного алгоритма
  - 2.2 Локальность данных и вычислений
  - 2.3 Возможные способы и особенности параллельной реализации алгоритма
  - 2.4 Масштабируемость алгоритма и его реализации
  - 2.5 Динамические характеристики и эффективность реализации алгоритма
  - 2.6 Выводы для классов архитектур
  - 2.7 Существующие реализации алгоритма
- 3 Литература

# AlgoWiki: классификация алгоритмов

## 1 Linear algebra problems

### 1.1 Matrix and vector operations

#### 1.1.1 Vector operations

1. **Dot product**
  1. **Dot product**
  2. **Parallel prefix scan algorithm using dot product**
2. **Uniform norm of a vector** (Fast Fourier transform, serial/parallel version)
3. **Convolution**
4. **The serial-parallel summation method**

#### 1.1.2 Matrix-vector operations

##### 1.1.2.1 Multiplying a noninvertible matrix by a vector

1. **Dense matrix-vector multiplication**

##### 1.1.2.2 Multiplying a matrix of special form by a vector

1. **Fourier transform**

1. **Fast Fourier transform for complex dimension**
  1. **Fast Fourier transform for powers of two**
    1. **Cooley-Tukey Fast Fourier Transform radix-2 case**
    2. **Fast Fourier transform for even (power of 2)**
  2. **Fast Fourier transform for complex dimension with arbitrary prime divisors (2,3,5,7)**
2. **Fast Fourier transform for prime dimension**

#### 1.1.3 Matrix operations

1. **Dense matrix multiplication**
  1. **Dense matrix multiplication (serial version for real matrices)**
  2. **Strassen's algorithm**

### 1.2 Matrix decompositions

#### 1.2.1 Matrix decomposition problem

##### 1.2.1.1 Triangular decompositions

1. **Gaussian elimination (finding the LU decomposition)**
  1. **LU decomposition using Gaussian elimination without pivoting**
  2. **LU decomposition via Gaussian elimination**
    1. **Gaussian elimination, compact scheme for triangular matrices and its modifications**
      1. **Compact scheme for Gaussian elimination: Dense matrix**
      2. **Compact scheme for Gaussian elimination: Triangular matrix**
        1. **Gaussian elimination, compact scheme for triangular matrices, serial version**
        2. **Serial doubling algorithm for the LU decomposition of a triangular matrix**
        3. **Serial-parallel algorithm for the LU decomposition of a triangular matrix**
    2. **LU decomposition using Gaussian elimination with pivoting**
      1. **Gaussian elimination with column pivoting**
      2. **Gaussian elimination with row pivoting**
      3. **Gaussian elimination with diagonal pivoting**
      4. **Gaussian elimination with complete pivoting**

##### 1.2.1.2 Cholesky method

1. **Cholesky decomposition**

#### 1.2.2 Available triangular decompositions for matrices of special form

1. **Unitary-orthogonal factorizations**

1. **QR decomposition of dense nonsingular matrices**
  1. **Gram-Schmidt (orthogonal) method for the QR decomposition of a matrix**
  2. **Householder (reflections) method for the QR decomposition of a matrix**
  3. **Householder (reflections) method for the QR decomposition of a sparse matrix, real/complex version**
  4. **Orthogonalization method**
    1. **Classical orthogonalization method**
    2. **Householder orthogonalization method with reorthogonalization**
  5. **Triangular decomposition of a Gram matrix**
2. **QR decomposition methods for dense Hessenberg matrices**
  1. **Gram-Schmidt (orthogonal) method for the QR decomposition of a (real) Hessenberg matrix**
  2. **Householder (reflections) method for the QR decomposition of a (real) Hessenberg matrix**
3. **Reducing matrices to complex forms**

1. **Unitary reductions to Hessenberg form**
  1. **Householder (reflections) method for reducing a matrix to Hessenberg form**
  2. **Classical (orthogonal) Householder (reflections) method for reducing a matrix to Hessenberg form**
2. **Unitary reductions to Schur form**
  1. **Classical (orthogonal) Householder (reflections) method for reducing a matrix to Hessenberg form**
    1. **Classical (orthogonal) Householder (reflections) method for reducing a matrix to Hessenberg form**
3. **Unitary reductions to orthogonal form**
  1. **Householder (reflections) method for reducing a symmetric matrix to orthogonal form**
  2. **Gram-Schmidt (orthogonal) reduction to orthogonal form**
  3. **Gram-Schmidt (orthogonal) reduction to orthogonal form**
4. **QR decomposition (finding eigenvalues and eigenvectors)**

##### 1.2.2.1 Unitary reductions to orthogonal form

1. **Householder (reflections) reduction of a matrix to orthogonal form**

##### 1.2.2.2 Singular value decomposition

1. **Singular value decomposition (finding singular values and singular vectors)**

### 1.3 Solving systems of linear algebraic equations

#### 1.3.1 Direct methods

1. **Upper triangular**
    1. **Triangular matrices**
      1. **Forward substitution**
      2. **Backward substitution**
      3. **Singular matrices**
        1. **Forward and backward substitution for banded matrices**
        2. **Serial doubling algorithm for solving banded matrices**
        3. **Serial-parallel variants of the backward substitution**
  2. **Methods for solving tridiagonal SLS**
    1. **Methods based on the conventional LU decomposition**
      1. **Thomas algorithm**
        1. **Thomas algorithm, polynomial version**
        2. **Revised Thomas algorithm, polynomial version**
      2. **Serial doubling algorithm**
        1. **Serial doubling algorithm for the LU decomposition of tridiagonal matrices**
        2. **Serial doubling algorithm for solving tridiagonal matrices based on the LU decomposition and backward substitutions**
    2. **Other methods**
      1. **Reduction method**
        1. **Complex reduction method**
        2. **Reduction method repeated for a new right-hand side**
      2. **Tridiagonal Thomas algorithm**
        1. **Tridiagonal Thomas algorithm, polynomial version**
        2. **Revised tridiagonal Thomas algorithm, polynomial version**
      3. **Cyclic reduction**
        1. **Complex cyclic reduction**
        2. **Cyclic reduction repeated for a new right-hand side**
      4. **Bandwidth method**
  3. **Methods for solving block triangular matrices**
    1. **Block forward substitution (real version)**
    2. **Block backward substitution (real version)**
  4. **Methods for solving block banded matrices**
    1. **Forward and backward substitution for block banded matrices**
    2. **Serial doubling algorithm for solving block banded matrices**
  5. **Methods for solving block banded matrices**
    1. **Methods based on the conventional LU decomposition**
      1. **Block Thomas algorithm**
      2. **Serial-parallel variants for solving block systems of linear algebraic equations based on the LU decomposition and backward substitutions**
    2. **Other methods**
      1. **Tridiagonal Thomas algorithm, block version**
      2. **Block cyclic reduction**
      3. **Block bandwidth method**
2. **Solving systems of linear algebraic equations with coefficient matrices of special form whose inverses are known**
  1. **High Performance Conjugate Gradient (HPCG) benchmark**
  2. **Block-cyclic preconditioned method (BCGS)**
  3. **Block-cyclic algorithm**

### 1.4 Solving eigenvalue problems

1. **QR eigenvalue decomposition (finding eigenvalues and eigenvectors)**
  1. **QR algorithm**
    1. **QR algorithm as implemented in SCILAPACK**
    2. **Classical (orthogonal) Householder (reflections) method for reducing a matrix to Hessenberg form**
    3. **Hessenberg QR algorithm as implemented in SCILAPACK**
    4. **Symmetric QR algorithm as implemented in SCILAPACK**
      1. **Householder (reflections) method for reducing a symmetric matrix to orthogonal form**
      2. **Symmetric tridiagonal QR algorithm as implemented in SCILAPACK**
      3. **QR algorithm for complex Hermitian matrices as implemented in SCILAPACK**
      4. **Householder (reflections) method for reducing a complex Hermitian matrix to symmetric tridiagonal form**
      5. **Symmetric tridiagonal QR algorithm as implemented in SCILAPACK**
  2. **The Jacobi (orthogonal) method for solving the symmetric eigenvalue problem**
    1. **Classical Jacobi (orthogonal) method with pivoting for symmetric matrices**
    2. **Serial Jacobi (orthogonal) method for symmetric matrices**
    3. **Serial Jacobi (orthogonal) method with thresholds for symmetric matrices**
  3. **Lanczos algorithm**
    1. **Lanczos algorithm in exact arithmetic (with reorthogonalization)**
2. **Partial eigenvalue problem**
  1. **Method of deflation**
  2. **Singular value decomposition (finding singular values and singular vectors)**
    1. **Jacobi (orthogonal) method for finding singular values**
    2. **Serial Jacobi (orthogonal) method for finding singular values**
    3. **Jacobi method with a specific choice of vectors for finding singular values**
  3. **QR algorithm as applied to singular value decomposition arrays**

### 1.5 Algebra of polynomials

1. **Horner's method**

## 2 Algorithms on lists and arrays

### 2.1 Search algorithms

1. **Linear search** (Finding an item in an arbitrary list:  $O(n)$ )
2. **Binary search** (Finding the position of a target value within a sorted array:  $O(\log(n))$ )

### 2.2 Sorting algorithms

1. **Binary tree sort**
2. **Bubble sort**
3. **Large context and parallel variants**

### 2.3 Graph algorithms

1. **Graph traversal**
  1. **Breadth-First Search (BFS)**
  2. **Depth-First Search (DFS)**
  3. **Single Source Shortest Path (SSSP)**
    1. **Dijkstra's algorithm (DFA) for unweighted graphs**
    2. **Shortest path algorithms**
    3. **Bellman-Ford algorithm**
    4. **Shortest path algorithms**
  4. **Shortest Path (SP)**
    1. **Shortest Path (SP)**
    2. **Shortest Path (SP)**
  5. **Traverse a closure of a directed graph**
    1. **Random's algorithm**
  6. **Longest common path**
  7. **Construction of the minimum spanning tree (MST)**
    1. **Kruskal's algorithm**
    2. **Prim's algorithm**
    3. **Greedy algorithm**
2. **Search for isomorphic subgraphs**
  1. **Ullmann's algorithm**
  2. **VF2 algorithm**
3. **Graph connectivity**
  1. **Edmonds-Karp algorithm for finding the connected components**
  2. **DFS algorithm**
  3. **Tarjan's strongly connected components algorithm**
  4. **SCC algorithm for finding the strongly connected components**
  5. **Tarjan's biconnected components algorithm**
  6. **Tarjan-Atkinson biconnected components algorithm**
  7. **Tarjan's algorithm for finding the bridges of a graph**
  8. **Flow connectivity of a graph**
  9. **Tarjan's edge connectivity algorithm**
4. **Finding maximal flow in a transportation network**
  1. **Ford-Fulkerson algorithm**
  2. **Edmonds-Karp algorithm**
5. **Other minimal cost flow in a transportation network**
  1. **Augmenting problem**
  2. **Flow augmentation algorithm**
  3. **Successive shortest path algorithm**
  4. **Successive shortest path algorithm**
6. **Successes centrality algorithm**

## 3 Computational geometry

1. **Finding the diameter of a point set**
2. **Finding the convex hull of a point set**
3. **Deconvolution**
4. **Vertex diagram**
5. **Point-in-polygon problem**
6. **Convex polygon intersection**
7. **Maximal polygon intersection**

### 3.1 Computer graphics

1. **Line drawing algorithms** (approximating a line segment on discrete graphical media)
2. **Drawing** (table parts of a three-dimensional scene)
3. **Ray tracing** (rendering realistic images)
4. **Global illumination** (Raytracing of illumination and reflection from other objects)

## 4 Computer analysis and modeling

### 4.1 Computer benchmarks

1. **High Performance Conjugate Gradient (HPCG) benchmark**
2. **Linpack benchmark**

### 4.2 Algorithms of quantum system simulation

1. **Algorithms of quantum computation simulation**
  1. **Single-qubit problem of a two-qubit system**
  2. **Two-qubit problem of a two-qubit system**
  3. **Quantum Fourier transform simulation**

*Осенняя школа по информационным технологиям ОИЯИ*

*Благодарю за внимание!*

*[voevodin@parallel.ru](mailto:voevodin@parallel.ru)*

*14 ноября 2022, ОИЯИ, Дубна*