МАССИВНО-ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ПРЕДОБУСЛОВЛЕННЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ С РАЗРЕЖЕННЫМИ МАТРИЦАМИ БОЛЬШОГО РАЗМЕРА

И.Е. Капорин[1], О.Ю. Милюкова[2], Ю.Г. Бартенев[3]

[1]Вычислительный центр им. А.А.Дородницына РАН, Москва
[2]Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, Москва
[3]Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский НИИ экспериментальной физики, Саров

Для больших разреженных систем линейных алгебраических уравнений (порядка до десятков миллионов), возникающих, в частности при дискретизации краевых задач для эллиптических уравнений в частных производных, описаны массивно-параллельные алгоритмы приближенного решения. Продемонстрирована возможность их эффективной параллельной реализации на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью при числе процессов MPI до 1500.

Введение

Одной из наиболее часто встречающихся трудоемких стандартных вычислительных задач является решение невырожденных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $Ax = b$ с разреженной $n \times n$-матрицей A большого размера n. При этом возможность экономии памяти дает итерационным методам серьезное преимущество по сравнению с методами точной разреженной треугольной факторизации, если требуется решать задачи большого размера. Кроме того, итерационные методы обладают более гибкой структурой вычислений, что облегчает их параллельную реализацию. Однако для многих важных классов задач известные массивно-параллельные итерационные методы (например, методы проектирования на крыловские подпространства с диагональным или блочно-диагональным предобусловливанием) обладают недостаточной надежностью и эффективностью.

Таким образом, решение разреженных СЛАУ на высокопроизводительных многопроцессорных системах все еще является открытой проблемой вычислительной математики и требует дальнейших исследований. Вместе с тем, достаточно широко распространилось мнение, что в настоящее время следует разрабатывать только такие методы решения прикладных задач большого размера, которые вообще не приводят к необходимости решения разреженных СЛАУ (т.н. «matrix-free methods»). Представляется, однако, что дальнейшая разработка массивно-параллельных решателей СЛАУ достаточно перспективна ввиду наличия больших теоретических и практических заделов (как в области построения решателей, так и в способах их эффективного использования), а также ясных перспектив их развития, связанных, например, с оптимизацией используемых предобусловливателей. Ниже описано достаточно общее, эффективное и надежное предобусловливание [1-3, 8], пригодное для ускорения метода сопряженных градиентов и других итерационных методов, использующих проекцию на крыловские подпространства (BiCGStab, GMRes). Для задач, возникающих при сеточной дискретизации пространственных объектов или их поверхностей, используемый предобусловливатель можно рассматривать как особый вариант метода разделения на подобласти с налеганием. Также приводятся результаты тестирования этих решателей на реальных задачах.

1. Предобусловливание посредством оптимального согласования приближенных треугольных разложений перекрывающихся подматриц

Алгоритмической основой реализованных решателей является предобусловливание, использующее специальный метод согласования приближенных треугольных факторизаций перекрывающихся главных подматриц исходной матрицы коэффициентов [3]. Количество используемых главных подматриц принимается равным доступному числу процессов MPI, что обеспечивает хорошую параллельную масштабируемость.

Применяются итерационные методы проекций на крыловские подпространства

$$x_i - x_0 \in K_i(Hr_0; HA) = \mathrm{span}(Hr_0, HAHr_0, ..., (HA)^{i-1} Hr_0),$$

где H – матрица-предобусловливатель. Таким образом, невязка i-го приближения к решению имеет вид $r_i = b - Ax_i = \pi_i(AH)r_0$, где $\pi_i(t)$ – подходящий многочлен, удовлетворяющий $\pi_i(0)=1$ (так, $\pi_i(\cdot)$ в методе GMRes выбирается из условия минимизации евклидовой нормы невязки). Ключевым моментом является то, что если предобусловленная матрица AH достаточно близка к единичной матрице I, хотя бы «в среднем», то степень многочлена i (а тогда и число итераций метода), обеспечивающая достаточную малость нормы невязки, оказывается не слишком большой (см., напр., [3]). Следовательно, необходима разработка технологии построения матриц-предобусловливателей H, обеспечивающих достаточно хорошее приближение $I \approx AH$, и в то же время представимых в виде, допускающем построение эффективного массивно-параллельного алгоритма, реализующего операцию $z = Hy$, где y - произвольный n-вектор. Поставленная задача весьма нетривиальна ввиду противоречивости указанных требований к H.

Опишем теперь конструкцию предобусловливателя, предназначенного для применения к матрицам с достаточно «сильной» диагональю (например, к положительно определенным матрицам), который лишь несущественно сложнее «блочного метода Якоби», однако способен обеспечивать существенно более быструю сходимость итераций.

Пусть матрица A переупорядочена и разбита на блоки, причем на блочной диагонали расположены p квадратных блоков размера n_s, $1 \le s \le p$. Обозначим $k_s = n_1 + ... + n_s$, и пусть $m_s \ge n_s$ – размеры расширенных блоков. Определим прямоугольные матрицы

$$V_s = [e_{j_s(1)} | ... | e_{j_s(m_s - n_s)} | e_{k_{s-1}+1} | ... | e_{k_s}],$$

столбцы которых являются единичными n-векторами, где $k_{s-1}+1, ..., k_s$ представляют собой индексы s-го блока, а $j_s(1), ..., j_s(m_s - n_s)$ являются индексами перекрытия, причем $j_s(.) \le k_{s-1}$. Для построения индексов перекрытия s-го блока используется множество столбцовых позиций соответствующего блока строк матрицы A^q, где $q>0$ (заметим, что при $q=0$ перекрытие пусто, и получается т.наз. блочный метод Якоби). Применим теперь к каждой расширенной $m_s \times m_s$-подматрице $V_s^T A V_s$ приближенное треугольное разложение 2-го порядка «по значению» ILU2(τ) (the 2nd order LU-factorization), см. [4]:

$$V_s^T A V_s = L_s U_s + L_s R_s + K_s U_s - S_s,\ \|R_s\| = O(\tau),\ \|K_s\| = O(\tau),\ \|S_s\| = O(\tau^2),$$

где R_s и K_s – основные матрицы погрешностей (строго треугольные, верхняя и нижняя соответственно), S_s – остаточная матрица погрешностей, $0 < \tau \le 1$ – порог отсечения, $s = 1, ..., p$. Предлагаемый предобусловливатель, получивший обозначение BIILU(p;q)-ILU2(τ) (от Block Incomplete Inverse LU), запишем в следующем виде [1, 2]:

$$H = \sum_{s=1}^{p} V_s U_s^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_s} \end{bmatrix} L_s^{-1} V_s^T .$$

Строгое обоснование оптимальности такого метода предобусловливания (при заданной заранее структуре перекрытий) имеется в случае произвольной симметричной положительно определенной матрицы A (когда $L_s = U_s^T$, а для отыскания U_s применяется IC2(τ)-разложение), см. [1, 3]. Отметим, что для решения СЛАУ с несимметричной матрицей, не обладающей «сильной» диагональю, можно использовать другое представление для H, см. [1, 3], а к подматрицам типа $V_s^T A V_s$ применять более общее разложение ML-ILU(τ) [6, 7].

Реализация на FORTRAN/MPI соответствующих матрично-векторных операций аналогична описаннной в [2, 5]. В параллельных алгоритмах, реализующих предобусловленные методы BiCGStab и GMRes, для умножения матрицы коэффициентов на вектор используется ее распределенное представление, отвечающее специальному аддитивному разложению

$$A = \sum_{s=1}^{p} \widetilde{V}_s [A_s \mid C_s] \widetilde{W}_s^T , \ \widetilde{V}_s = [e_{k_{s-1}+1} | ... | e_{k_s}] , \ \widetilde{W}_s = [e_{k_{s-1}+1} | ... | e_{k_s} | e_{j'_s(1)} | ... | e_{j'_s(m'_s - n_s)}] ,$$

где $n_s \times n_s$-матрица A_s является s-м диагональным блоком матрицы A, а C_s – $n_s \times (m'_s - n_s)$-матрица, содержащая ненулевые столбцы подматрицы, расположенные слева и справа от A_s, индексы $j'(\cdot)$ представляют собой номера соответствующих столбцовых позиций в A. Используются p процессов MPI (по числу слагаемых аддитивных представлений A и H), причем s-й процесс выполняет вычисления, отвечающие умножению на вектор s-го слагаемого матрицы A или предобусловливателя H. Для реализации межпроцессорных обменов разработаны надежные и эффективные алгоритмы на базе операций MPI_Send и MPI_Recv.

2. Программная реализация решателей СЛАУ и их тестирование

На основе описанного выше подхода был разработан комплекс программных модулей (библиотека VC_RAN_SLAU), предназначенный для приближенного решения больших разреженных систем линейных алгебраических уравнений с симметричными положительно-определёнными и несимметричными матрицами. Созданный программный код, написанный на языке FORTRAN-90 с использованием интерфейса MPI, удовлетворяет достаточно высоким требованиям надежности и эффективности функционирования, отличаясь в то же время небольшим объемом (менее 200 Kbytes текста) и полной замкнутостью. Библиотека создавалась для пакетов программ инженерного анализа, разработанных в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Расчеты задач и замеры времени проводились на вычислительной системе ЭВМ ВЦКП ВНИИЭФ. Вычислительные узлы связаны между собой быстрой коммуникационной сетью. В каждом узле многопроцессорной системы (возможно, за исключением последнего узла) во всех случаях использовались все вычислительные ядра.

Результаты тестирования на несимметричных СЛАУ, возникающих при моделировании задач аэродинамики пакетом ЛОГОС Аэрогидромеханика [9], а также на СЛАУ с симметричными положительно определенными матрицами, возникающих при расчете напряженно-деформированного состояния конструкций пакетом ЛОГОС Прочность [10] и при расчете задач подземной фильтрации пакетом НИМФА [11] (см. табл.1), приведены на рис.1, 2.

Таблица 1. Структурные характеристики тестовых матриц

Матрица	n	$nz(A)$	тип	Источник
C20_A_0420_CFL_50	3 655 200	126 831 200	5x5 несимм.	ЛОГОС-Аэро
ONERA_M6_A_0386_CFL_100	9 494 800	329 975 600	5x5 несимм.	ЛОГОС-Аэро
Duck_A_0486_CFL_100	24 473 160	851 654 700	5x5 несимм.	ЛОГОС-Аэро
49_750	2 615 169	190 101 409	симм.пол.опр.	ЛОГОС-Проч
p4_6	4 216 212	228 406 070	симм.пол.опр.	ЛОГОС-Проч
18mln	18 063 492	1 335 851 712	симм.пол.опр.	ЛОГОС-Проч
Balt12	12 140 928	314 737 280	симм.пол.опр.	НИМФА
32mln	32 022 528	815 096 620	симм.пол.опр.	НИМФА

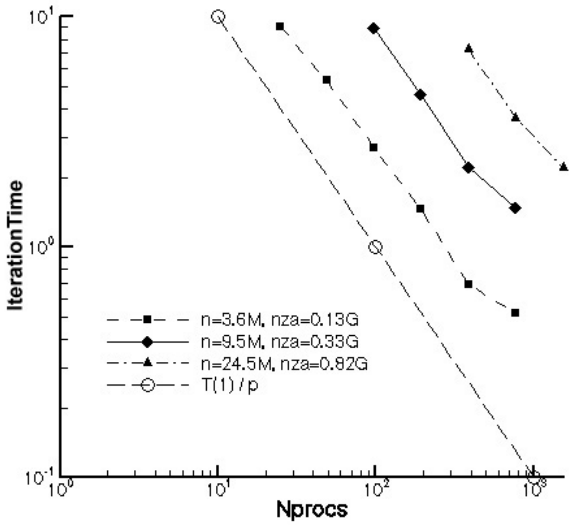

Рис. 1. Зависимости времени счета от числа процессов MPI для задач с несимметричными матрицами

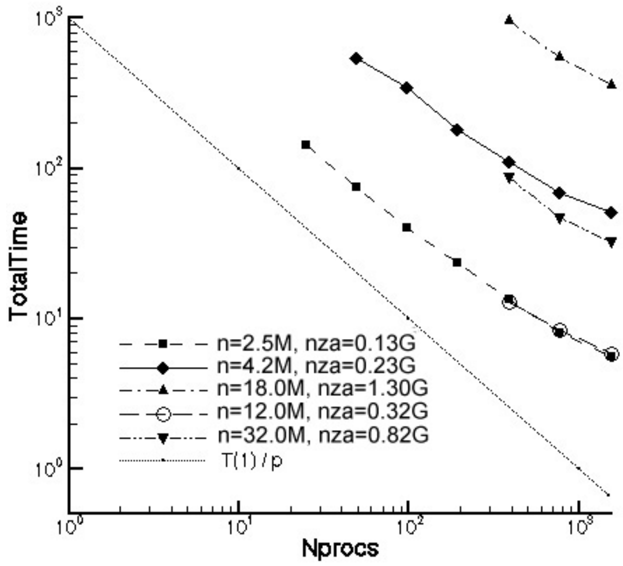

Рис. 2. Зависимость времени счета от числа процессов MPI для задач с симметричными положительно определенными матрицами

3. Выводы и направления развития

Использование предлагаемого массивно-параллельного предобусловливания для ускорения итераций методов сопряженных градиентов или BiCGStab оказалось эффективным для решения СЛАУ размера до $n = 3.2 \cdot 10^7$ и числом ненулевых элементов до

$nz = 1.3 \cdot 10^9$, возникающих в расчетах по пакетам ЛОГОС и НИМФА. При этом наблюдалась достаточно хорошая параллельная масштабируемость при использовании до 1500 процессов MPI. Производительность построенных алгоритмов предобусловливания может быть улучшена за счет более сбалансированного разбиения матрицы на перекрывающиеся блоки, а также на пути разработки способов предварительной подготовки матрицы СЛАУ, например, посредством двустороннего мелкоблочно-диагонального масштабирования. Дальнейшее повышение эффективности решателей (особенно при использовании итераций GMRes) может быть достигнуто за счет применения адаптивного полиномиального предобусловливания.

Авторы выражают благодарность В.А. Ерзунову, А.Н. Стаканову и Е.Б. Щаниковой за помощь в разработке, тестировании параллельных алгоритмов решения СЛАУ большого размера и за интеграцию VC_RAN_SLAU в комплекс библиотек параллельных решателей СЛАУ LParSol [12] ВНИИЭФ для «промышленного» применения.

Работа выполнялась по договору между ВЦ РАН и РФЯЦ-ВНИИЭФ, а также поддерживалась Целевыми программами П-15 и П-18 президиума РАН, грантом РФФИ 11-01-00786, грантом НШ-5264.2012.1 и программой ОМН №3 РАН.

Литература

1. Kaporin I.E., Konshin I.N. A parallel block overlap preconditioning with inexact submatrix inversion for linear elasticity problems // Numer. Linear Algebra Appls. 2002. V. 9, P. 141-162.
2. Капорин И.Е., Милюкова О.Ю. Массивно-параллельный алгоритм предобусловленного метода сопряженных градиентов для численного решения систем линейных алгебраических уравнений // Сб. трудов отдела проблем прикладной оптимизации ВЦ РАН (под ред. В.Г. Жадана). М.: Изд-во ВЦ РАН, 2011. С. 32-49.
3. Kaporin I.E. New convergence results and preconditioning strategies for the conju-gate gradient method // Numer. Linear Algebra Appls. 1994. V. 1, N. 2. P. 179-210.
4. Kaporin I.E. High quality preconditioning of a general symmetric positive matrix based on its $U^T U + U^T R + R^T U$-decomposition // Numer. Linear Algebra Appls. 1998. V. 5. P. 484-509.
5. Милюкова О.Ю. Некоторые параллельные итерационные методы с факторизованными матрицами предобусловливания для решения эллиптических уравне-ний на треугольных сетках // Ж. вычисл. матем. и матем. физики. 2006. Т.46. № 6. С. 1096-1112.
6. Saad Y. Multilevel ILU with reorderings for diagonal dominance // SIAM J. Sci. Comput. 2005. V. 27. P. 1032-1057.
7. Kaporin I. Multilevel ILU preconditionings for general unsymmetric matrices // Proc. Int. Conf. NUMGRID/VORONOI-2008, Moscow, 10-13 June 2008. P.150-157.
8. Капорин И.Е., Милюкова О.Ю. Предобусловливание итерационных методов для эффективного массивно-параллельного решения систем линейных алгебраических уравнений // Труды XIII Международного семинара «Супервычисления и математическое моделирование», 3-7 октября 2011. Саров, 2012. С. 243-252.
9. Козелков А.С., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К. и др. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассапереноса на суперЭВМ // Тезисы докладов на XIV Международном семинаре «Супервычисления и математическое моделирование», 1-5 октября 2012. Саров, 2012. С. 108.

10. Циберев К.В., Авдеев П.А., Артамонов М.В. и др. Пакет программ ЛОГОС. Об-зор текущих возможностей решения задач прочности // Тезисы докладов на XIV Международном семинаре «Супервычисления и математическое моделирование», 1-5 октября 2012. Саров, 2012. – С.159-161.
11. Алейников А.Ю., Бардина М.Н., Горев В.В. и др. Параллельная версия комплек-са программ НИМФА // Тезисы докладов на XIII Международном семинаре «Супервычисления и математическое моделирование», 3-7 октября 2011. Саров, 2011. – С. 26-27.
12. Бартенев Ю.Г., Бондаренко Ю.А., Ерзунов В.А. и др. Комплекс LParSol для решения СЛАУ // Тезисы докладов на XIII Международном семинаре «Супервычисления и математическое моделирование», 3-7 октября 2011. Саров, 2011. С. 34-36.