УДК 519.6

О.В. ПОПОВ

ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАЛЕЛЬНИХ АЛГОРИТМІВ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ З РОЗРІДЖЕНИМИ МАТРИЦЯМИ

Розглядаються проблеми організації обчислення розв'язків систем лінійних алгебраїчних рівнянь та часткової узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень з розрідженими симетричними матрицями. Запропоновано модифікацію паралельних алгоритмів розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь з розрідженими трикутними матрицями для підвищення ефективності розпаралелювання.

Вступ. При чисельному розв'язуванні науково-технічних задач у багатьох випадках виникає необхідність вирішувати задачу (або декілька задач) лінійної алгебри. Причому, як правило, розв'язування задач лінійної алгебри займає значну частину (50 % і більше) часу розв'язування всієї задачі загалом. Наприклад, задачі лінійної алгебри виникають при дискретизації крайових задач або задач на власні значення проекційно-різницевим методом (скінченних різниць, скінченних елементів).

Важливою особливістю задач лінійної алгебри, що виникають при дискретизації, є високий порядок їх матриць – до десятків мільйонів. Інша важлива особливість – матриці таких задач є розрідженими, тобто кількість ненульових елементів матриць таких задач складає kn, де n – порядок матриці, а $k << n$. Структура матриць визначається нумерацією невідомих задачі. У багатьох випадках матриці дискретних задач симетричні і додатно визначені або напіввизначені.

Через високі порядки, незважаючи на розріджену структуру матриць, розв'язування таких задач вимагає значних обчислювальних ресурсів, які можуть бути надано сучасними комп'ютерами з паралельною організацією обчислень. Тому є актуальною проблема створення ефективних паралельних алгоритмів розв'язування задач з розрідженими матрицями. Під ефективним алгоритмом розв'язування ми розуміємо алгоритм, що дозволяє отримати достовірний розв'язок задачі з мінімальним використанням ресурсів комп'ютера – процесорів, пам'яті, часу. Ефективність паралельних алгоритмів оцінюється, як правило, за допомогою коефіцієнтів прискорення й ефективності [1]. Важливо також визначити, який алгоритм найбільш ефективний для розв'язування конкретної задачі.

Постановки та методи розв'язування задач. Розглянемо дві задачі з розрідженими матрицями, які виникають, зокрема, при розв'язуванні методом скінченних елементів задач розрахунку міцності конструкцій:

– СЛАР з розрідженою симетричною додатно означеною або додатно напівозначеною матрицею

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}; \tag{1}$$

– часткова узагальнена алгебраїчна проблема власних значень (АПВЗ) з розрідженими симетричними матрицями, одна з яких (звичайно $\boldsymbol{A}$) додатно означена, а друга може бути додатно напівозначеною

$$\boldsymbol{Ax} = \lambda \boldsymbol{Bx}. \tag{2}$$

Для знаходження нормального псевдорозв'язку СЛАР (1) з розрідженою симетричною додатно напівозначеною матрицею доцільно використати метод триетапної регуляризації [1, 2], який полягає в наступному:

1) послідовне розв'язування двох СЛАР

$$(\boldsymbol{A} + \alpha_0 \boldsymbol{I})\, \boldsymbol{z} = \boldsymbol{b}_k, \qquad (\boldsymbol{A} + \alpha_0 \boldsymbol{I})\, \boldsymbol{u} = \boldsymbol{Az}; \tag{3}$$

при довільно вибраному параметрі $\alpha_0 > 0$ (наприклад $\alpha_0 = 0{,}01$);

2) розв'язування СЛАР $(\boldsymbol{A} + \alpha_0 \boldsymbol{I})\, \boldsymbol{w} = \boldsymbol{u}_{\text{H}}$, де $\boldsymbol{u}_{\text{H}} \equiv \boldsymbol{v}\left(\max\limits_i |v_i|\right)^{-1}$, $\boldsymbol{v}$ – будь-який з векторів розв'язку $\boldsymbol{u}$ другої системи з (3), та обчислення $\mu = \max\limits_i |w_i|$;

3) перевірка виконання нерівності $(2\alpha_0 + \|\boldsymbol{A}\|\,\varepsilon_b)\mu \le \varepsilon$; якщо нерівність виконується, то необхідна точність ε досягнута при вибраному значенні α_0; якщо нерівність не виконується, то за формулою $\alpha_1 \le \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\varepsilon}{\mu} - \|A\|\varepsilon_b\right)$ визначається нове значення зсуву α_1 і розв'язуються системи (3) з матрицею $\boldsymbol{A} + \alpha_1 \boldsymbol{I}$ – обчислюється нове наближення $\boldsymbol{u}$, яке забезпечує необхідну точність ε нормального псевдорозв'язку.

Для розв'язування часткової узагальненої АПВЗ (2) з розрідженими матрицями використовують метод ітерацій на підпросторі [1], який полягає у побудові послідовності підпросторів E_t (t=1,2,...), яка збігається до підпростору E_∞, що містить в собі шукані власні вектори (відповідають r мінімальним власним значенням). Отже, для $t = 1, 2, \ldots$ виконуються наступні операції:

1) обчислення проекції матриці $\boldsymbol{A}$ на підпростір E_t $\boldsymbol{A}_t = \boldsymbol{X}_t^{\Phi} \boldsymbol{Y}_{t-1} \equiv \boldsymbol{X}_t^{\Phi} \boldsymbol{A} \boldsymbol{X}_t$, де $\boldsymbol{X}_t$ – розв'язок СЛАР

$$\boldsymbol{AX}_t = \boldsymbol{Y}_{t-1}; \tag{4}$$

2) обчислення проекції матриці $\boldsymbol{B}$ на підпростір E_t $\quad \boldsymbol{B}_t = \boldsymbol{X}_t^{\mathsf{T}}\boldsymbol{W}_t \equiv \boldsymbol{X}_t^{\mathsf{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}_t$;

3) розв'язування повної проблеми власних значень для проекцій

$$\boldsymbol{A}_t\boldsymbol{Z}_t = \boldsymbol{B}_t\boldsymbol{Z}_t\boldsymbol{\Lambda}_t;$$

4) обчислення чергового наближення $\boldsymbol{Y}_t = \boldsymbol{W}_t\boldsymbol{Z}_t$;

5) перевірка умов закінчення ітераційного процесу ($i < r$) $\quad \dfrac{\left|\lambda_i^{(t)} - \lambda_i^{(t-1)}\right|}{\lambda_i^{(t)}} \le \varepsilon$.

Якщо умови виконуються після t ітерацій, то за наближений розв'язок задачі (2) приймається $\quad \lambda_i^* = \lambda_i^{(t+1)}, \quad \boldsymbol{X}^* = \boldsymbol{X}_{t+1}\boldsymbol{Z}_{t+1}, \quad i = 1, 2, \dots, r$ (тут мається на увазі, що власні значення впорядковано за зростанням $0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \dots \le \lambda_r \le \dots$).

З викладеного випливає, що розв'язування СЛАР (1) з додатно визначеною матрицею займає ключове місце при розв'язуванні складніших задач. Для розв'язування СЛАР (1) з симетричною додатно означеною матрицею використовується метод Холецького або Гаусса без вибору головного елемента. При розв'язуванні доцільно виділити три підзадачі:

– розвинення матриці СЛАР в добуток трьох матриць $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ або $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}$, де $\boldsymbol{L}$– нижня трикутна, $\boldsymbol{U}$– верхня трикутна, $\boldsymbol{D}$– діагональна матриці;

– розв'язування СЛАР з нижньою трикутною матрицею

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \quad \text{або} \quad \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}; \tag{5}$$

– розв'язування СЛАР з верхньою трикутною матрицею

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{y} \quad \text{або} \quad \boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{y}. \tag{6}$$

Слід зазначити, що в методах ітерацій на підпросторі та триетапної регуляризації розв'язується по декілька СЛАР) (3) або (4) з однією і тією ж матрицею. Тому розвинення матриці виконується один раз, а надалі для кожної нової правої частини виконується тільки розв'язування СЛАР (5) та (6) з трикутними розрідженими матрицями.

Поряд з розв'язуванням СЛАР (1) з додатно визначеною розрідженою матрицею в методах ітерацій на підпросторі та триетапної регуляризації багато арифметичних операцій необхідно для обчислення добутку розрідженої симетричної матриці на прямокутну матрицю.

Структури розріджених матриць. Вибір ефективних паралельних алгоритмів для розв'язування СЛАР (1) з розрідженою симетричною додатно означеною матрицею визначається структурою матриці. З метою зменшення загальної кількості арифметичних операцій (у першу чергу при розвиненні матриці), як правило, проводиться перенумерація невідомих задач і відповідне перевпорядкування матриці. Враховуючи значний вплив збалансованості завантаження паралельних процесів на ефективність розпаралелювання, доцільно отримати матрицю стрічкової або регулярної профільної структури з якомога ближчим розташуванням ненульових елементів до головної діагоналі (рис. 1).

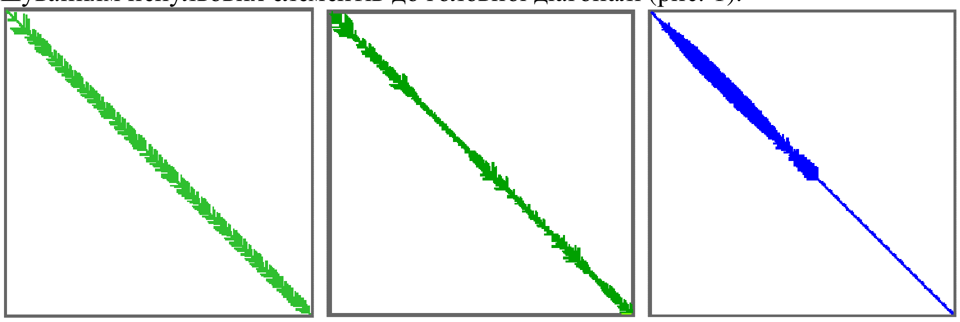

РИС. 1. Стрічкові або профільні розріджені матриці

В роботі [1] описано паралельні алгоритми методу Холецького для розв'язування СЛАР з розрідженою симетричною матрицею регулярної структури – одновимірний блочний циклічний алгоритм для випадку стрічкової або профільної матриці та блочний алгоритм для випадку блочно-діагональної матриці з обрамленням. Ефективність цих алгоритмів залежить від ширини стрічки (або її еквівалента для профільної матриці) і підвищується зі зростанням цього параметра. Але загальна кількість арифметичних операцій пропорційна квадрату цього параметра. При його зростанні заповненість стрічки або профілю матриці ненульовими елементами падає. Тому у випадку низької (менше 15 – 20 %) заповненості стрічки або профілю матриці ненульовими елементами доцільно використати для оптимізації структури матриці алгоритм мінімальної степені [3], який дозволяє мінімізувати загальну кількість арифметичних операцій, необхідних для розвинення матриці. На рис. 2 представлено профільні структури, які отримано в результаті застосування алгоритму мінімальної степені. Заповненість профілю ненульовими елементами в цьому випадку не перевищує 1 %. Структуру такої матриці називають також хмарочосною.

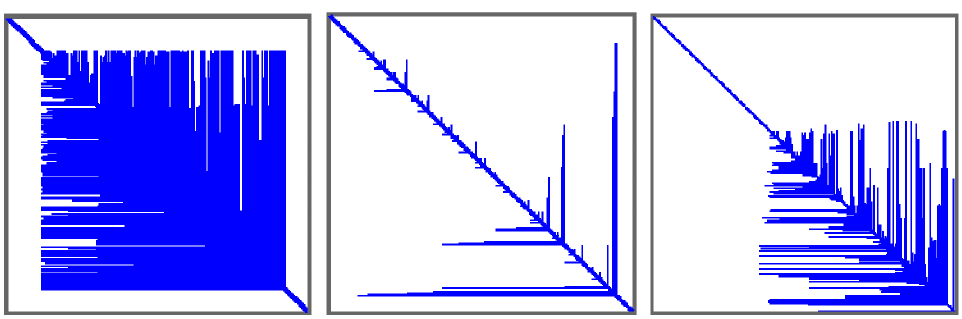

РИС. 2. Розріджені матриці хмарочосної структури

Зменшення загальної кількості арифметичних операцій, необхідних для розвинення матриці, досягається за рахунок виключення з обчислень внутрішніх елементів профілю матриці, які залишаються нульовими у верхній $\boldsymbol{U}$ (або нижній $\boldsymbol{L}$) трикутній матриці $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}$ (або $\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$) розвинення матриці СЛАР (1). В роботі [4] представлено паралельний алгоритм методу Гаусса розв'язування СЛАР (1) з матрицею хмарочосної структури.

Схеми розподілу між процесами та зберігання розріджених матриць хмарочосної структури. Досить добра збалансованість завантаження процесів забезпечується використанням так званих циклічних схем розподілу й обробки матриць [5]. У випадку розрідженої матриці хмарочосної структури доцільно використовувати рядково-циклічні схеми розподілу матриці [1]. При цьому кращої збалансованості завантаження паралельних процесів у більшості випадків можна досягти, розподіляючи між процесами циклічно рядки верхнього трикутника матриці. Алгоритми, які використовують таку схему розподілу, дозволяють добитися приблизно рівного обсягу обчислень та обмінів для кожного процесу і практично виключити вплив ефекту Гайдна.

Ненульові елементи розрідженої матриці хмарочосної структури, які розподілено даному процесу, доцільно зберігати по рядках. Крім того необхідно зберігати інформацію про розташування цих елементів у матриці. Для зменшення обсягу інформації, яка зберігається, доцільно для кожного рядка визначити групи розташованих підряд ненульових або нульових елементів і зберігати, наприклад, інформацію про кількість елементів у кожній з таких груп.

Блочно-циклічна обробка при розв'язуванні трикутних систем. Як зазначалося вище, для розв'язування СЛАР з матрицею хмарочосної структури використовуються рядково-циклічні алгоритми. Вони забезпечують досить добру збалансованість завантаження процесів, але при розв'язуванні СЛАР (5) і (6) з розрідженими трикутними матрицями виникають великі накладні витрати на пошук ненульових елементів у стовпчику матриці.

Для зменшення накладних витрат, які можуть призвести до значного збільшення часу розв'язування систем (5) і (6), на пошук ненульових елементів у стовпчику матриці необхідно замість порядкового обчислення розв'язку перейти до блочного. Розв'язки обчислюються блоками з s рядків. За рахунок цього значно скорочуються (майже в s раз) витрати на пошук ненульових елементів, який проводиться одночасно в s стовпчиках матриці. Хоча при цьому частина операцій виконується не паралельно, а послідовно. Розмір блоку s має бути не менше кількості процесів, але і не перевищувати 1 000 – 2 000, щоб час, який витрачається на послідовний обробіток, складав незначну частину загального часу розв'язування системи. На жаль, більш точно визначити цей параметр s важко, тому що він суттєво залежить від структури конкретної матриці.

Так, при розв'язуванні СЛАР, порядок якої 2 385 822, з розрідженою матрицею, структуру якої зображено на рис. 2 в центрі, з 25 правими частинами, час розв'язування систем (5) і (6) скоротився більше ніж у 50 раз при використанні блоків розміром $s = 494$ і 247 паралельних процесів.

Аналогічно можна модифікувати і паралельні алгоритми обчислення добутку розрідженої матриці на прямокутну. Це дозволяє значно скоротити час розв'язування часткової узагальненої АПВЗ (2), а також СЛАР (1) з багатьма правими частинами і значно підвищити ефективність паралельних обчислень.

А.В. Попов

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ С РАЗРЕЖЕННЫМИ МАТРИЦАМИ

Рассматриваются проблемы организации вычисления решений систем линейных алгебраических уравнений и частичной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений с разреженными симметричными матрицами. Предложена модификация параллельных алгоритмов решения систем линейных алгебраических уравнений с разреженными треугольными матрицами для повышения эффективности распараллеливания.

A.V. Popov

OPTIMIZATION OF PARALLEL ALGORITHMS OF PROBLEMS WITH SPARSE MATRICES SOLVING

The problems of organization of solving of the systems of linear algebraic equations and partial generalized eigenvalue algebraic problem with sparse symmetric matrices are considered. Modification of parallel algorithms of solving of the systems of linear algebraic equations with sparse triangular matrices is offered for the rise of efficiency.

1. *Параллельные* алгоритмы решения задач вычислительной математики / А.Н. Химич, И.Н. Молчанов, А.В. Попов и др. – Киев: Наук. думка, 2008. – 248 с.
2. *Попов А.В., Химич А.Н.* Исследование и решение первой основной задачи теории упругости // Компьютерная математика. – 2003. – № 2. – С. 105–114.
3. *Джордж А., Лю Дж.* Численное решение больших разреженных систем уравнений. – М.: Мир, 1984. – 333 с.
4. *Хіміч О.М., Полянко В.В.* Паралельні блочно-циклічні алгоритми методу Гауса розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь з розрідженими матрицями // Матеріали XV всеукр. конф. «Сучасні проблеми математики та інформатики» – Львів: Львівський нац. ун-т, 2008. – С. 125.
5. *Численные* методы для многопроцессорного вычислительного комплекса ЕС / В.С. Михалевич, Н.А. Бик,…, А.Н. Химич и др.; Под ред. И.Н. Молчанова.– М.: Издание ВВИА им. проф. Н.Е. Жуковского, 1986. – 401 с.

Получено 31.03.2009