УДК 519.6

О.М. ХІМІЧ, В.В. ПОЛЯНКО

ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАЛЕЛЬНОГО ІТЕРАЦІЙНОГО ПРОЦЕСУ ДЛЯ ЛІНІЙНИХ СИСТЕМ З РОЗРІДЖЕНИМИ МАТРИЦЯМИ

Розглядається один із підходів до побудови передобумовлювача для методу спряжених градієнтів розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями нерегулярної структури. Запропоновано та досліджено передобумовлювачі на основі методу паралельних перерізів.

Вступ. При розв'язуванні систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) з матрицями великих порядків нерідко реалізація на комп'ютері прямих методів, навіть тих, що враховують розрідженість матриці, може виявитися досить складною і неефективною. При реалізації паралельних алгоритмів додається також проблема збалансованості завантаження процесів та витрати на обмін даними між ними. Проблеми машинної реалізації прямих методів пояснюються обмеженням об'єму оперативної пам'яті, зниженням швидкодії при використанні дискової пам'яті та непередбачені витрати у випадку матриць з нерегулярною структурою. З цієї точки зору для розв'язування СЛАР доцільно використовувати швидкозбіжні ітераційні методи [1, 2].

Значний виграш від використання ітераційних методів можна отримати у задачах з розрідженими матрицями нерегулярної структури. Особливо відчутною може бути різниця у випадку паралельних обчислень, оскільки у цьому випадку параметри методу можна підібрати таким чином, щоб мінімізувати кількість як обчислювальних, так і комунікаційних операцій, а також ефективніше балансувати завантаженість процесів.

Постановка задачі. Для знаходження наближеного розв'язку лінійного операторного рівняння

$$Au = f \qquad (1)$$

з невиродженим оператором A, заданим у дійсному гільбертовому просторі H, використаємо ітераційну схему [3]

$$Bx_{k+1} = \alpha_{k+1}(B - \tau_{k+1}A)x_k + (1 - \alpha_{k+1})Bx_{k-1} + \alpha_{k+1}\tau_{k+1}f,$$
$$k = 1, 2,\ldots, \quad (2)$$
$$Bx_1 = (B - \tau_1 A)x_0 + \tau_1 f,\ x_0 \in H,$$

де ітераційні параметри α_{k+1} і τ_{k+1} знаходяться за формулами

$$\tau_{k+1} = \frac{(Bw_k, r_k)}{(Bw_k, w_k)}, k = 0,1,...,$$
$$\alpha_{k+1} = \left(1 - \frac{\tau_{k+1}}{\tau_k}\frac{(Bw_k, r_k)}{(Bw_{k-1}, r_{k-1})}\frac{1}{\alpha_k}\right)^{-1}, k = 1,2,..., \alpha_1 = 1, \quad (3)$$
$$r_k = A\,x_k - f;\quad Bw_k = r_k;$$

Для збіжності ітераційного процесу необхідно виконання умов

$$\gamma_1 B \le A \le \gamma_2 B,\ \gamma_1 > 0, A = A^* > 0,\ B = B^* > 0,$$

Відомо [3], що якщо H – скінченновимірний простір, тобто $H = H_N$, то метод збігається за кількість ітерацій, що не перевищує розмірність простору. В загальному випадку для визначення кількості ітерацій справедлива оцінка

$$n \ge n_0(\varepsilon) = \ln(0.5\,\varepsilon) / \ln\rho, \text{ де } \rho = \left(1 - \sqrt{\xi}\right)/\left(1 + \sqrt{\xi}\right),\ \xi = \gamma_1 / \gamma_2.$$

Швидкість збіжності ітераційного процесу визначається величиною констант енергетичної еквівалентності ($\xi = \gamma_1 / \gamma_2$) матриці A і передобумволювача B.

Умови закінчення ітераційних процесів, що гарантують дану точність ε, та оцінки повної похибки розв'язку СЛАР випливають з [4].

Якщо для яких-небудь значень x_{k-1}, x_k і x_{k+1}, виконується нерівність

$$\frac{\|x_{k+1} - x_k\|}{\|x_k\|} \le \frac{\varepsilon}{1+\varepsilon}\frac{\tau_{k+1}}{\|A^{-1}B\|}, \quad (4)$$

то для наближеного розв'язку x_k має місце оцінка

$$\|x_k - u\| / \|u\| \le \varepsilon \quad (5)$$

Для оцінки повної похибки розв'язків СЛАР з симетричною додатно визначеною матрицею і наближеними вихідними даними , які задовольняють умовам

$$\|\Delta A\| / \|A\| \le \varepsilon_A,\ \|\Delta f\| / \|f\| \le \varepsilon_f,\ \|\Delta A\|\,\|A^{-1}\| < 1 \text{ (або } \|\Delta A\, A^{-1}\| < 1),$$

має місце наступний результат.

Якщо чисельний розрахунок моделі виконаний ітераційним процесом (2) з закінченням за умовою (4), то знайдений розв'язок задовольняє нерівності (5), а повна похибка наближеного розв'язку оцінюється формулою

$$\frac{\|x_k - u_T\|}{\|u_T\|} \le \varepsilon + \frac{H(1+\varepsilon)(\varepsilon_A + \varepsilon_f)}{1 - \varepsilon_f},$$

Побудова передобумовлювача. Кількість ітерацій та час знаходження розв'язку системи (1) значною мірою залежить від вигляду та властивостей передобумовлювача *B*. Одним із найбільш ефективних способів, є побудова *B* з вихідної матриці методом неповної факторизації [5], проте такий підхід у загальному випадку не гарантує збереження додатної визначеності матриці, що є необхідним для збіжності методу [1]. З іншого боку, при розв'язуванні СЛАР на MIMD-комп'ютері важливим є побудувати *B* так, щоб мінімізувати кількість міжпроцесорних обмінів та забезпечити збалансованість завантаження процесів.

З цієї точки зору оптимальною є блочно-діагональна матриця, де кількість блоків відповідає числу процесів, що беруть участь у розв'язуванні задачі [6]. Це, у свою чергу, диктує спосіб розподілу даних для розв'язування СЛАР (1). Матрицю A та вектори x і f доцільно розподіляти згідно з блочним способом: якщо n – порядок матриці, p – число процесів, то початково перші (n/p) рядків матриці A зберігаються у першому процесі, другі (n/p) рядків – у другому, p-ті (n/p) рядків – у p-му. Аналогічний спосіб застосовуємо для векторів.

Блочно-діагональний передобумовлювач. Відомо [7], що до блочно-діагонального вигляду з обрамленням матриця може бути зведена методом паралельних перерізів. Портрет матриці складається з діагональних блоків ненульових елементів та відповідних їм блоків в останніх рядках та стовпчиках матриці. Цей метод не відкидає ненульові елементи, а лише змінює їхнє розташування, тому система з такою перетвореною матрицею дає точний розв'язок СЛАР. Але, якщо діагональні блоки можуть бути оброблені процесами незалежно, то у випадку з обрамленням число міжпроцесорних обмінів досить значне. Тому для побудови передобумовлювача *B* до вихідної матриці застосуємо метод паралельних перерізів з подальшим відкиданням обрамлення. При цьому варто зазначити, що зберігається додатня визначеність матриці [6].

Розглянемо побудову передобумовлювача на прикладі. Візьмемо симетричну матрицю порядка 16, розподілену між 4 процесами блочним способом (рис. 1). Сірим кольором позначено ненульові елементи або такі, які будуть модифіковуватися під час факторизації матриці; подвійні горизонтальні смуги розділяють частини матриці, які зберігаються у різних процесах.

Оскільки серед стовпчиків наведеної матриці є такі, ненульові елементи яких розподілені між різними процесами, то під час факторизації виникатиме необхідність у міжпроцесорних обмінах. Сенс побудови блочно-діагональної матриці полягає у тому, щоб звести матрицю до такого вигляду, де ненульові елементи будь-якого стовпчика зберігаються в межах одного процесу. Дотримання цієї умови дозволяє провести факторизацію матриці без використання міжпроцесорних обмінів.

Розглянемо граф, що відповідає наведеній матриці (рис. 1). Кількість вершин графа дорівнює порядку матриці. Дві вершини графа вважаються зв'язані ребром, якщо елемент на перетині відповідного рядка і стовпчика є ненульовим. За допомогою методу паралельних перерізів здійснимо перевпорядкування вершин графа (рис. 2). Пунктиром позначено множини вершин розділювачів графа. Нумерація вершин поза розділювачами організована відповідно до структури рівнів з коренем у псевдопериферійній вершині. Вершини з множин розділювачів нумеруються в останню чергу.

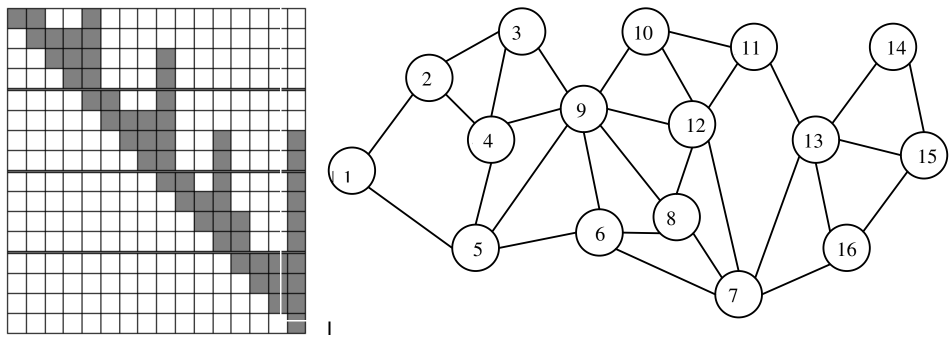

РИС. 1. Портрет розрідженої матриці та відповідний граф

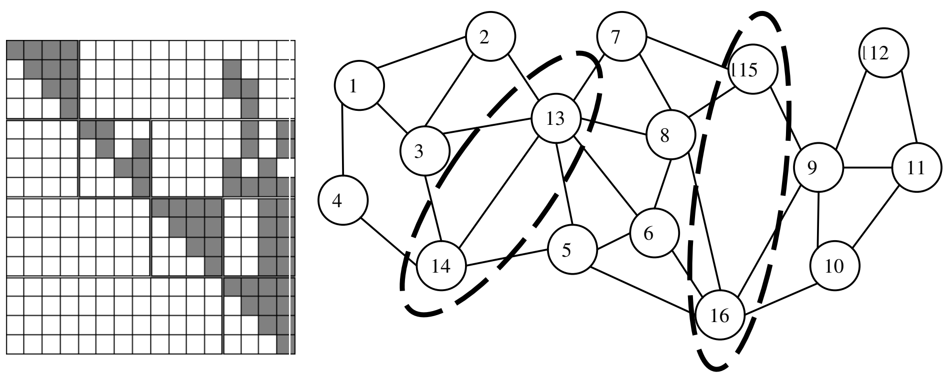

РИС. 2. Нумерація вершин графа і портрет матриці після впорядкування

За цією схемою кількість блоків між перерізами має бути на одиницю менша за число процесів. Таким чином досягається значне зменшення кількості міжпроцесорних зв’язків, а, наприклад під час факторизації обміни не виконуються зовсім. Як наслідок, при збільшенні кількості процесорів витрати на міжпроцесорні обміни зростатимуть повільніше, ніж для прямого методу.

Разом з тим, на відміну від прямого методу, при використанні методу паралельних перерізів з’являється додаткове обмеження на максимально можливе число процесів, що пов’язано з особливостями графа матриці. Так, кількість процесів не може перевищувати половину довжини структури рівнів, побудованої з основою у периферійній вершині. Має місце твердження.

Нехай n – порядок матриці, а z – кількість ненульових елемнтів. Тоді максимальна кількість блоків, на які можна розбити матрицю методом паралельних перерізів, не може перевищувати $\frac{n}{4z}\left(3n+\sqrt{9n^2-8z}\right)$.

Дійсно, через те, що метод паралельних перерізів не змінює кількість ненульових елементів z, то, оскільки внаслідок роботи методу всі ненульові елементи будуть знаходитися або в діагональних блоках, або у блоках останнього стовпчика і рядка блоків, то їх сумарне число складатиме $s^2(3p-2)$. Отже, $n^2(3p-2) \geq p^2z$. Звідси отримаємо верхнє обмеження для p.

Слід також зазначити, що більш ефективним буде застосування пропонованого методу для тих матриць, у графах яких структура рівнів розкладається на блоки, що мають приблизно однакову кількість вершин, оскільки у цьому випадку завантаження процесів буде найбільш рівномірним. З точки зору портрету матриці це означає, що кількість ненульових елементів у кожному з рядків та стовпчиків має бути приблизно однаковою. Одним із прикладів таких матриць є стрічкові.

Поперемінно-трикутний метод (ПТМ) передбачає вибір передобумовлювача у фактризованому вигляді:

$$B = (E + \omega R_1)(E + \omega R_2),$$

де $R_1 + R_2 = A$ (збіжність методу та вибір ω див. у [3]).

Представлення A методом паралельних перерізів у блочно-діагональному вигляді з обрамленням дозволяє побудувати ефективний паралельний алгоритм розв'язування рівняння $Bw = r$ з блочно-діагональними трикутними матрицями R_1 і R_2.

Результати. Методи апробовано на кластерних комплексах Інституту кібернетики СКІТ та Інпарком. Дослідження проводились як на тестових задачах, наприклад зі стрічковими матрицями, побудованими шляхом дискретизації методом скінченних елементів змішаної крайової задачі для оператора Лапласа у прямокутному паралелепіпеді (таблиця), так і на реальних задачах аналізу міцності конструкцій [8].

ТАБЛИЦЯ. Часові характеристики блочно-діагонального передобумовлювача за різної кількості процесів для матриці порядку 1000000 з шириною стрічки 1000

Процеси	1	2	4	8	16	24	32
Факторизація,с	3149,35	973,34	445,49	230,29	152,85	106,73	70,21
Ітерації,с	46,69	12,59	6,08	3,99	1,93	1,49	2,64
Всього, с	3196,04	985,93	451,57	234,28	154,78	108,22	72,85

Проведено дослідження залежності часу розв'язування від параметрів матриці та кількості процесів, що брали участь в обчисленнях, отримано практичні характеристики прискорення алгоритму, побудовано їх залежності від числа процесів (рис. 3.).

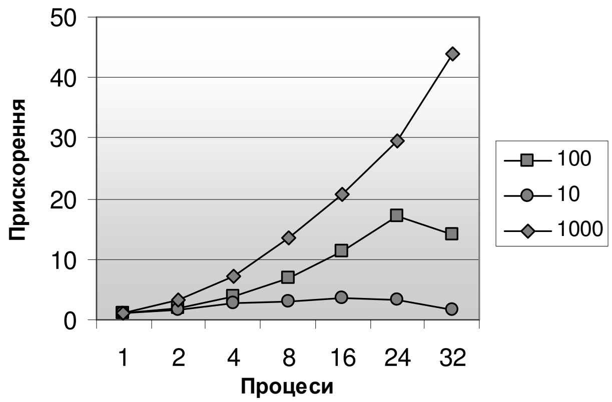

РИС. 3. Графіки залежності прискорення алгоритму від числа процесів для випадків з різною шириною стрічки

Для ряду прикладних задач ітераційний метод, виявився більш ефективним у порівнянні з прямим методом (рис 4).

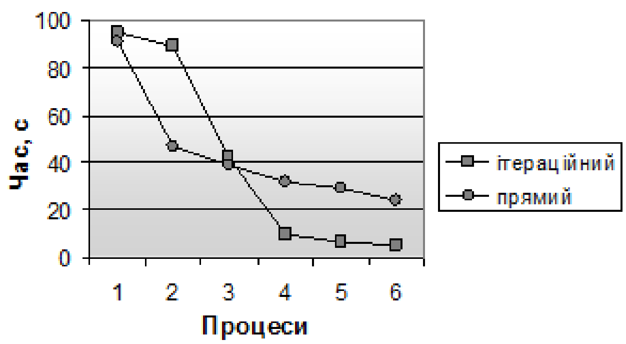

РИС. 4. Порівняння прямого та ітераційного методів розв'язування СЛАР з матрицею порядку 13710 у задачі аналізу міцності споруди АЕС

Висновки. Розглядається один із підходів до побудови передобумовлювача для методу спряжених градієнтів розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями нерегулярної структури, виходячи з критерію мінімізації комунікаційних витрат для паралельного алгоритму. Запропоновано блочно-діагональний та поперемінно-трикутний передобумовлювач на основі методу паралельних перерізів. Розглянуто питання збіжності ітераційного алгоритму, збалансованого розподілу даних по процесах та паралельної організації обчислень. Результати експериментів для тестових і прикладних задач показали високу ефективність паралельного алгоритму.

А.Н Химич, В.В. Полянко

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ИТЕРАЦИОННОГО ПРОЦЕССА
ДЛЯ ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ С РАЗРЕЖЕННЫІМИ МАТРИЦАМИ

Рассматривается один из подходов к построению предобуславливателя для метода сопряженных градиентов решения СЛАУ с разреженными матрицами нерегулярной структуры. Предложено и исследовано предобуславливатели на основе метода параллельных сечений.

A.N. Khimich, V.V. Polyanko

OPTIMIZATION OF PARALLEL ITERATIVE PROCESS FOR THE LINEAR SYSTEMS WITH SPARSE MATRICES

Considered is one of approaches for construction a preconditioner for method of conjunctive gradients for solution SLAE with sparse matrices of irregular structure. Preconditioners, which are based on method of parallel section, is proposed and investigated.

1. *Saad Y.* Iterative Methods for Sparse Linear Systems. – PWS Publishing Company, 2000. – 448 p.
2. *Баландин М.Ю., Шурина Э.П.* Методы решения СЛАУ большой размерности – Новосибирск: изд-во НГТУ, 2000. – 70 с.
3. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных – М.: Наука, 1978. – 592 с.
4. *Химич А.Н., Яковлев М.Ф.* О полной погрешности расчета линейных математических моделей итерационными методами // Кибернетика и системный анализ. – 2002. - №5. – С. 132-142.
5. *Капорин И.Е., Коньшин И.Н.* Постфильтрация множителей IC2-разложения для балансировки параллельного предобусловливания // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2009. – **49**, № 6. – С. 940 – 957.
6. *Полянко В.В*. Оптимізація структури розрідженої матриці для побудови ефективного обчислювального алгоритму // Теорія оптимальних рішень. – 2010. – №9 – С. 45 – 53.
7. *Джордж А., Лю Дж.* Численное решение больших разреженных систем уравнений. – М.: Мир, 1984. – 333 с.
8. *ЛИРА* 9.4. Примеры расчета и проектирования / Ю.В. Гензерский, Я.Е. Слободян, В.П. Титок и др. – Киев: Изд-во НИИАСС, 2006. – 124 с.

Получено 29.03.2011