



Капорин И.Е., [Милюкова О.Ю.](#)

Оптимизация
факторизованных
предобусловливающих метода
сопряженных градиентов
для решения систем
линейных алгебраических
уравнений с симметричной
положительно
определенной матрицей

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Капорин И.Е., Милюкова О.Ю. Оптимизация факторизованных предобусловливающих метода сопряженных градиентов для решения систем линейных алгебраических уравнений с симметричной положительно определенной матрицей // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2013. № 13. 17 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-13>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

И.Е. Капорин , О.Ю.Милюкова

**Оптимизация факторизованных
предобусловливающих метода сопряженных
градиентов для решения систем линейных
алгебраических уравнений с симметричной
положительно определенной матрицей**

Москва — 2013

Капорин И.Е., Милюкова О.Ю.

Оптимизация факторизованных предобусловливателей метода сопряженных градиентов для решения систем линейных алгебраических уравнений с симметричной положительно определенной матрицей

В работе рассмотрена задача итерационного решения системы линейных алгебраических уравнений $Ax = b$ методом сопряженных градиентов с использованием факторизованного предобусловливателя вида $B = (I + LZ)Y(I + ZU)$, где $A = D + L + U$ представляет собой расщепление матрицы коэффициентов на строго нижнетреугольную, диагональную и строго верхнетреугольную. Представлен подход к отысканию диагональных матриц $Y > 0$ и Z , основанный на минимизации некоторой верхней оценки К-числа обусловленности матрицы, обратной к предобусловленной, применимый для любой симметричной положительно определенной матрицы A . Основными достоинствами предлагаемого нового метода являются: широкая область применимости, небольшое число арифметических действий на каждой итерации, хорошая параллелизуемость всех этапов вычислений, а также достаточное сокращение числа итераций при подходящей настройке алгоритма предобусловливания. Приводятся результаты расчетов тестовых задач.

Ключевые слова: метод сопряженных градиентов, факторизованный предобусловливатель, К-число обусловленности.

Kaporin Igor Evgenievich, Milyukova Olga Yurievna.

Optimization of the factorized preconditioners of conjugate gradient method for solving the linear algebraic systems with symmetric positive definite matrix

In the paper we consider the iterative solution of linear system $Ax = b$ by the conjugate gradient method using the factorized preconditioner $B = (I + LZ)Y(I + ZU)$, where $A = D + L + U$ is the additive splitting of the coefficient matrix into the strictly lower triangular, the diagonal, and the strictly upper triangular parts. For an arbitrary symmetric positive definite matrix A , the diagonal matrices $Y > 0$ and Z are constructed as the minimizers of a certain upper bound for the K-condition number of the inverse preconditioned matrix. The main advantages of the new method are as follows: wide range of applicability, low operation number count per iteration, good parallelizability for all the stages of computation, and sufficient reduction of the iteration number (for a properly chosen preconditioning parameters). Numerical results are given for several test problems.

Key words: conjugate gradient method, factorized preconditioner, the K-condition number.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 11-01-00786), целевых программ П-15 и П-18 президиума РАН, ОМН РАН №3, гранта НШ-5264.2012.1.

1. Введение

Одной из наиболее часто встречающихся трудоемких вычислительных задач является решение невырожденных систем линейных алгебраических уравнений $Ax=b$ с разреженной симметричной положительно определенной матрицей A . Для многих задач, например, отвечающих дискретным моделям на трехмерных сетках (в том числе неструктурированных), прямые методы разреженного треугольного разложения требуют возрастающего нелинейно по размеру задачи объема памяти, а также очень большого числа операций. Кроме того, эффективное распараллеливание соответствующих алгоритмов на большое число процессоров вызывает определенные трудности. Поэтому для задач с разреженными матрицами большого размера привлекательными являются итерационные методы. Из них наименьшего объема памяти требуют методы, использующие предобусловливатель в факторизованной форме с внедиагональными элементами множителей, совпадающими с элементами исходной матрицы коэффициентов. Более того, эти методы допускают преобразование расчетных формул (так называемый прием Айзенштата [1]), позволяющее уменьшить число операций почти вдвое по сравнению с очевидной реализацией.

Пусть A является вещественной симметричной положительно определенной матрицей размера $n \times n$:

$$A = A^T > 0. \quad (1)$$

В работе [2] предложен метод GSSOR-CG, в котором матрица предобусловливания имеет вид

$$B = (D^{-1} + L)D(D^{-1} + L^T) \quad (2)$$

где L строго нижняя треугольная часть матрицы A , элементы диагональной матрицы D выбираются из условия совпадения диагональных элементов матриц B и A или критерия равенства строчных сумм $Ae + \sigma D_A e = Be$, где $e = (1, 1, \dots, 1)^T$, D_A диагональная часть матрицы A , а выбор малого параметра $0 \leq \sigma \ll 1$ зависит от конкретной задачи. В случае решения системы линейных алгебраических уравнений, отвечающей дискретной краевой задаче для уравнения Пуассона на ортогональной сетке, метод GSSOR-CG совпадает с методами ICCG(0) [3] или MICCG(0) [4] при соответствующем выборе матрицы D . Необходимым условием сходимости метода сопряженных градиентов с предобусловлителем (2) является положительность диагональных элементов матрицы D . Для перечисленных выше методов построения этой матрицы в случае (1) достаточным условием для этого является наличие свойства диагонального преобладания [3]. В работах [5,6] предложены способы распараллеливания метода GSSOR-CG, основанные на использовании упорядочения узлов сетки, согласованного с разбиением области расчета. Эти способы распараллеливания показали свою хорошую эффективность по крайней мере для умеренного числа процессоров в случае решения двумерных задач.

В настоящей работе представлен более общий подход к построению предобусловливателей B типа (2), применимый для любой симметричной положительно определенной матрицы (1) и во многих случаях обеспечивающий достаточно эффективное предобусловливание метода сопряженных градиентов.

2. Факторизованная матрица предобусловливания

Будем предполагать, что матрица A имеет единичную главную диагональ. В противном случае эту матрицу следует симметрично масштабировать при помощи положительной диагональной матрицы $(\text{Diag}(A))^{-1/2}$ и соответствующим образом преобразовать правую часть и вектор решения системы линейных алгебраических уравнений $Ax = b$. Рассмотрим стандартное аддитивное расщепление матрицы коэффициентов

$$A = I + L + L^T,$$

где L – строго нижняя треугольная матрица.

Рассмотрим обобщение предобусловливания (2) вида

$$B = (I + LZ)W^{-1}(I + ZL^T), \quad (3)$$

где W, Z – диагональные матрицы, причем $W > 0$.

Прежде всего, отметим, что и в этом случае остается возможность использования приема Айзенштата. С одной стороны, нетрудно проверить, что справедливо тождество

$$\begin{aligned} C &= W^{-1}(I + ZL^T)B^{-1}A(I + ZL^T)^{-1} = (I + LZ)^{-1}(I + L + L^T)(I + ZL^T)^{-1} \\ &= Z^{-1}(I + ZL^T)^{-1} + (I + LZ)^{-1}(Z^{-1} + (I - 2Z^{-1})(I + ZL^T)^{-1}). \end{aligned}$$

При этом матрица C , очевидно, является симметричной положительно определенной. Кроме того, ее умножение на вектор $z = Cv$ можно реализовать по формулам

$$(I + ZL^T)p = v, \quad (I + LZ)q = Z^{-1}v + (I - 2Z^{-1})p, \quad z = Z^{-1}p + q.$$

С другой стороны, рассматриваемая система уравнений $Ax = b$ сводится к эквивалентной системе уравнений $Cy = f$ при помощи замены

$$x = (I + ZL^T)^{-1}y, \quad f = W^{-1}(I + ZL^T)B^{-1}b.$$

Таким образом, для отыскания приближенного решения достаточно воспользоваться предобусловленным методом сопряженных градиентов, описанным ниже в п.3., примененным к задаче $Cy = f$, с заменой A на C и B на W^{-1} . Если сравнить число арифметических действий на каждой итерации, реализованной по указанным формулам со стандартной реализацией (включающей умножение матрицы A на вектор), то станет очевидным, что использование приема Айзенштата позволяет существенно уменьшить объем арифметической работы и время счета. С другой стороны, заметим, что собственные значения матриц $B^{-1}A$ и WC совпадают.

Параметрами предобусловливания, подлежащими оптимизации (в смысле улучшения спектральных свойств матриц $B^{-1}A$), являются элементы диагональных матриц

$$Z = \text{Diag}_{1 \leq i \leq n}(z_i), \quad W = \text{Diag}_{1 \leq i \leq n}(w_i), \quad (4)$$

где $w_i > 0, i = 1, 2, \dots, n$. Очевидно, что отсюда следует $B = B^T > 0$.

В случае использования формулы (3) симметрично предобусловленная матрица, определяемая как $M = W^{1/2} C W^{1/2}$, имеет вид

$$M = (W^{-1/2} + L Z W^{-1/2})^{-1} A (W^{-1/2} + W^{-1/2} Z L^T)^{-1},$$

а ее обратная равна

$$M^{-1} = (W^{-1/2} + W^{-1/2} Z L^T) A^{-1} (W^{-1/2} + L Z W^{-1/2}). \quad (5)$$

В работе [7] была доказана (Теорема 4.3) оценка погрешности предобусловленного метода сопряженных градиентов (см. ниже п.3) вида

$$\frac{\|x_k - x\|_A}{\|x_0 - x\|_A} \leq (K(M)^{2/k} - 1)^{k/2}, \quad n > k > 2 \log_2 K(M),$$

где через

$$K(M) = \left(\frac{1}{n} \text{trace} M \right)^n / \det M \quad (6)$$

обозначено K -число обусловленности симметризуемой матрицы M (матрица называется симметризуемой, если существует преобразование подобия, переводящее ее в симметричную положительно определенную). Если на соответствующем этапе доказательства этой оценки использовать простое тождество

$$\frac{(\lambda_i + \lambda_{n+1-i})^2}{4\lambda_i \lambda_{n+1-i}} = \frac{(\lambda_i^{-1} + \lambda_{n+1-i}^{-1})^2}{4\lambda_i^{-1} \lambda_{n+1-i}^{-1}}, \quad \lambda_i = \lambda_i(M),$$

и учесть, что $\lambda_i^{-1} = \lambda_i(M^{-1})$, то можно получить аналогичную оценку погрешности вида

$$\frac{\|x_k - x\|_A}{\|x_0 - x\|_A} \leq (K(M^{-1})^{2/k} - 1)^{k/2}, \quad n > k > 2 \log_2 K(M^{-1}).$$

Соответственно, для числа итераций предобусловленного метода сопряженных градиентов, достаточного для уменьшения начальной нормы погрешности в ε^{-1} раз, можно вывести верхнюю оценку вида

$$i_\varepsilon \leq \varphi(K(M^{-1}), \varepsilon^{-1}),$$

где функция $\varphi(s, t)$ определена при $s > 1, t > 1$ и монотонно возрастает по каждому из двух аргументов (способ построения такой функции можно найти, напр., в [8]). Заметим, что указанные две оценки итерационной погрешности не являются неулучшаемыми (например, использование приведенной оценки через $K(M)$ приводит к границе числа итераций, примерно вдвое большей по сравнению с неулучшаемой оценкой из [8]). Таким образом, предлагается получить подходящую верхнюю оценку для величины $K(M^{-1})$, где матричный функционал K определен в (6), и выбрать матричные параметры W, Z из условия минимума этой оценки.

Используя определение (6) функционала K и формулу (5), имеем

$$\begin{aligned}
K(M^{-1}) &= \left(\frac{1}{n} \text{trace} M^{-1} \right)^n \det M = \\
&= \det W \det A \left(\frac{1}{n} \text{trace} (W^{-1/2} + W^{-1/2} Z L^T) A^{-1} (W^{-1/2} + L Z W^{-1/2}) \right)^n.
\end{aligned} \tag{7}$$

Получим верхнюю оценку для величины $\text{trace}(M^{-1})$. Пусть произведение $G^T G$ является приближением к обратному симметрично-треугольному разложению матрицы A [8-10], то есть $G^T G \approx A^{-1}$, где G разреженная нижняя треугольная матрица с положительными диагональными элементами, обладающая заранее заданной структурой разреженности. Множество F позиций ненулевых элементов матрицы G выбирается в виде подмножества позиций ненулевых элементов матрицы A^q , отвечающего ее нижнетреугольной части. Согласно [8-10], значения ненулевых элементов матрицы G выбираются из условия $G = \arg \min_{(G)_{ij}, (i,j) \in F} K(GAG^T)$. Учитывая, что $(GAG^T)^{-1} \leq \frac{1}{\delta} I$, где $\delta = \lambda_{\min}(GAG^T) > 0$, имеем

$$\begin{aligned}
\text{trace}(\tilde{L}^T A^{-1} \tilde{L}) &= \text{trace}(\tilde{L}^T G^T (GAG^T)^{-1} G \tilde{L}) = \sum_{j=1}^n (e_j^T \tilde{L}^T G^T) (GAG^T)^{-1} (G \tilde{L} e_j) \\
&\leq \frac{1}{\delta} \sum_{j=1}^n (e_j^T \tilde{L}^T G^T) (G \tilde{L} e_j) = \frac{1}{\delta} \text{trace}(\tilde{L}^T G^T G \tilde{L}),
\end{aligned}$$

где $\tilde{L} = W^{-1/2} + L Z W^{-1/2}$, $e_j = (0, 0, 0, \dots, 1, \dots, 0)^T$, с элементом, равным 1 в j -й позиции. Следовательно,

$$\begin{aligned}
\text{trace}(M^{-1}) &\leq \frac{1}{\delta} \text{trace}((W^{-1/2} + L Z W^{-1/2})^T G^T G (W^{-1/2} + L Z W^{-1/2})) \\
&= \frac{1}{\delta} \|G W^{-1/2} + G L Z W^{-1/2}\|_F^2 \\
&= \frac{1}{\delta} \left(\sum_{i=1}^n \frac{(G^T G)_{ii}}{w_i} + 2 \sum_{i=1}^n \frac{(G^T (GL))_{ii} z_i}{w_i} + \sum_{i=1}^n \frac{((GL)^T (GL))_{ii} (z_i)^2}{w_i} \right) \\
&= \frac{1}{\delta} \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i - 2\gamma_i z_i + \beta_i z_i^2}{w_i},
\end{aligned} \tag{8}$$

где

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^n (G)_{ji}^2, \quad \beta_i = \sum_{j=1}^n (GL)_{ji}^2, \quad \gamma_i = -\sum_{j=1}^n G_{ji} (GL)_{ji}. \tag{9}$$

Очевидно, что $\alpha_i > 0$, $\beta_i \geq 0$. Учитывая (7), (8), имеем

$$K(M^{-1}) \leq \frac{\det A}{\delta^n n^n} \left(\prod_{i=1}^n w_i \right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i - 2\gamma_i z_i + \beta_i z_i^2}{w_i} \right)^n. \tag{10}$$

Следовательно, минимизировать надо функцию

$$g(z_i, w_i) = \left(\prod_{i=1}^n w_i^{1/n} \right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i - 2\gamma_i z_i + \beta_i z_i^2}{w_i} \right).$$

Выполнение необходимых условий экстремума $g'_{z_i} = 0$ приводит к равенствам

$$z_i = \frac{\gamma_i}{\beta_i} \text{ при } \beta_i \neq 0, \quad (11)$$

z_i не определено при $\beta_i = 0$, т. к. в этом случае $\gamma_i = 0$. Не ограничивая общности, положим

$$z_i = 1 \text{ при } \beta_i = 0. \quad (12)$$

При каждом i для указанного z_i достигается минимальное значение выражения $\alpha_i - 2\gamma_i z_i + \beta_i z_i^2$, равное $\delta_i = \alpha_i - \gamma_i^2 / \beta_i$ при $\beta_i \neq 0$ и $\delta_i = \alpha_i$ при $\beta_i = 0$. Заметим, что поскольку матрица GL является строго нижнетреугольной, то тогда $(GL)_{ii} = 0$, и поэтому для любого z_i (с учетом формул (9)) справедлива оценка

$$\alpha_i - 2\gamma_i z_i + \beta_i z_i^2 = \sum_{j=1}^n (G_{ji} + z_i (GL)_{ji})^2 \geq (G_{ii} + z_i (GL)_{ii})^2 = G_{ii}^2 > 0.$$

Следовательно, и при оптимальном выборе z_i , определяемом формулами (11), (12), получаем $\delta_i \geq (G_{ii})^2 > 0$. Тогда при выполнении (11), (12) имеем

$$g(z_i, w_i) = \prod_{i=1}^n w_i^{1/n} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\delta_i}{w_i} \right) = \left(n \prod_{i=1}^n \delta_i^{1/n} \right) \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\delta_i}{w_i} \right) / \left(\prod_{i=1}^n \frac{\delta_i}{w_i} \right)^{1/n}$$

Учитывая, что среднее арифметическое положительных чисел всегда не меньше их среднего геометрического, причем равенство имеет место тогда и только тогда, когда все эти числа равны между собой, получим $g(z_i, w_i) \leq n \prod_{i=1}^n \delta_i^{1/n}$, причем равенство имеет место, например, при $w_i = \delta_i$. Таким образом, минимум функции $g(z_i, w_i)$ достигается при

$$z_i = \begin{cases} \frac{\gamma_i}{\beta_i}, & \beta_i \neq 0, \\ 1, & \beta_i = 0, \end{cases} \quad w_i = \begin{cases} \alpha_i - \frac{\gamma_i^2}{\beta_i}, & \beta_i \neq 0, \\ \alpha_i, & \beta_i = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Эти значения z_i , w_i минимизируют оценку $K(M^{-1})$, определенную формулой (10).

Итак, для решения системы линейных алгебраических уравнений $Ax = b$ с разреженной симметричной положительно определенной матрицей A будем использовать метод сопряженных градиентов с предобусловливателем, определенным согласно (3), (4), (13), где $\alpha_i > 0$, $\beta_i \geq 0$, γ_i определены в (9). Условия сходимости метода сопряженных градиентов с таким предобусловливанием выполнены. Заметим, что для сходимости метода требуется только выполнение условия (1) и не требуется ни диагонального преобладания в матрице A , ни условия, чтобы A была М-матрицей.

3. Алгоритм метода

Алгоритм предобусловленного метода сопряженных градиентов имеет вид (см., напр., [1])

$$\begin{aligned} r_0 &= b - Ax_0, & p_0 &= w_0 = B^{-1}r_0, & v_0 &= r_0^T w_0; \\ k &= 0, 1, \dots: & q_k &= Ap_k, & \alpha_k &= v_k / p_k^T q_k, \\ x_{k+1} &= x_k + p_k \alpha_k, & r_{k+1} &= r_k - q_k \alpha_k, \\ w_{k+1} &= B^{-1}r_{k+1}, & v_{k+1} &= r_{k+1}^T w_{k+1}, \\ \beta_k &= v_{k+1} / v_k, & p_{k+1} &= w_{k+1} + p_k \beta_k, \end{aligned}$$

где $r_k = b - Ax_k$ представляет собой k -ю невязку, а x_0 произвольное начальное приближение (напр., $x_0 = 0$). Заметим, что реализация предобусловливания посредством решения системы уравнений $Bw_{k+1} = r_{k+1}$, где матрица B определена в (3), отвечает отказу от использования приема Айзенштата.

Алгоритм вычисления матрицы G можно найти, например, в работах [8-10]. Вычисление матрицы G начинается с определения множества F позиций ненулевых элементов матрицы G , которое мы выбираем в виде подмножества позиций ненулевых элементов матрицы A^q , отвечающего ее нижнетреугольной части. Затем для каждого $i=1, \dots, n$:

1) определяется матрица $S_i = V_i^T A V_i$, где $V_i = [e_{j_i(1)}, e_{j_i(2)}, \dots, e_{j_i(m_i)}]$,

m_i число структурно ненулевых элементов i -й строки G , $j_i(l)$ столбцовый индекс l -го ненулевого элемента i -й строки G ,

e_j j -й единичный n -вектор;

2) строится симметричная треугольная факторизация: $S_i = L_i L_i^T$;

3) вычисляется $z_i = L_i^{-1} v_i$, где $v_i = (0, 0, \dots, 0, 1)^T$ - последний единичный m_i -вектор;

4) расположение ненулевых элементов в i -й строке G определяется формулой: $e_i^T G = z_i^T V_i^T$.

После вычисления матрицы G вычисляются элементы матрицы GL (осуществляется умножение двух разреженных матриц: нижнетреугольной и строго нижнетреугольной). Элементы диагональных матриц W, Z вычисляются по формулам (9), (13).

Алгоритм обращения матрицы предобусловливания (3) аналогичен алгоритму обращения матрицы (2), описанному в [1].

4. Параллельный алгоритм метода

Для построения параллельного аналога описанного метода разобьем произвольную выпуклую область расчета на подобласти каким-либо образом, выберем некоторую нумерацию подобластей и будем использовать упорядочение узлов сетки, связанное с разбиением DDO (Domain Decomposition ordering) [6]. Для этого введем множество узлов разделителей – множество

узлов сетки в подобластях (или множество вершин графа матрицы), у которых имеются соседи из подобластей с большим номером. При использовании DDO [6] сначала идут все узлы сетки, не принадлежащие разделителям, причем в том же порядке, в каком они шли до переупорядочения. Затем идут узлы разделителей, причем сначала идут узлы разделителей из подобластей с большим номером, затем - с меньшим. При этом упорядочении узлов разделителей соответствующие номера подобластей монотонно не возрастают. Внутри каждой подобласти порядок следования узлов на разделителе возрастающий. Заметим, что в каждой подобласти можно ввести свое переупорядочение узлов сетки.

В соответствии с переупорядочением узлов переупорядочим матрицу A в виде $\bar{A} = PAP^T$, где P матрица перестановок. Тогда матрица предобусловливания \bar{B} имеет вид:

$$\bar{B} = (I + \bar{L}\bar{Z})\bar{W}^{-1}(I + \bar{Z}\bar{L}^T),$$

где \bar{L} строго нижнетреугольная часть переупорядоченной матрицы $\bar{A} = PAP^T$. Определим также матрицу L_1 из соотношения $\bar{L} = PL_1P^T$, откуда получаем $L_1 = P^T\bar{L}P$.

Остановимся подробнее на параллельном алгоритме вычисления матриц \bar{Z}, \bar{W} . Очевидно, что если G матрица, построенная для матрицы A согласно приведенному выше алгоритму, то $\bar{G} = PGP^T$ представляет собой матрицу, построенную для матрицы \bar{A} при выборе соответствующей структуры разреженности. Таким образом, необходимо распараллелить алгоритм построения матрицы G . В настоящей работе алгоритм определения множества F позиций ненулевых элементов матрицы G в виде подмножества позиций ненулевых элементов матрицы A^q , отвечающего ее нижнетреугольной части, не подвергался распараллеливанию. Затем осуществляется проекция множества F на подобласти, на которые разбита область расчета. Затем строятся матрицы G_k , представляющие собой части матрицы G , хранящиеся в k -м процессоре; это делается в каждом процессоре независимо с использованием матрицы A_k , т.е., соответствующей части матрицы A , хранящейся в процессоре с номером k . При этом нет необходимости обменов данными.

Перед определением матрицы $L_1 = P^T\bar{L}P$ необходимо, чтобы в каждом процессоре хранилась матрица S , состоящая из строк матрицы A , совпадающих с номерами столбцов, которые присутствуют в матрице G_k , так как в дальнейшем необходимо будет вычислять матрицу GL_1 . Поэтому необходимо выполнить пересылку соответствующих строк матрицы A в процессор с номером k . Построение матрицы $(L_1)_k = (P^T\bar{L}P)_k$ с числом строк, большим, чем число строк в A_k , осуществляется из матрицы S с учетом того, будет ли каждый рассматриваемый элемент S принадлежать матрице \bar{L} . При этом учитывается матрица перестановки P . На этапе формирования матрицы L_1 из матрицы S обменов данными между процессорами не требуется. Так как

$\overline{GL} = PGP^T PL_1P^T = PGL_1P^T$, то в каждом процессоре осуществляется умножение матрицы G_k на матрицу $(L_1)_k$, при этом также не требуется обменов данными. Затем в каждом процессоре вычисляются частичные суммы $\sum_i G_{ij}^2$, $\sum_i (GL)_{ij}^2$, $\sum_i G_{ij}(GL)_{ij}$ элементов, хранящихся в памяти процессора и осуществляется сборка по всем процессорам. В результате получаются диагональные матрицы $Diag(\tilde{\alpha}_j) = P^T Diag(\bar{\alpha}_j)P$, $Diag(\tilde{\beta}_j) = P^T Diag(\bar{\beta}_j)P$, $Diag(\tilde{\gamma}_j) = P^T Diag(\bar{\gamma}_j)P$, а затем $\tilde{Z} = P^T \bar{Z}P$, $\tilde{W} = P^T \bar{W}P$.

Для параллельной реализации обращения матрицы \bar{B} используется алгоритм, подробно описанный в работе [6]. В этом алгоритме используются старые номера строк и столбцов, которые были до переупорядочения, связанного с матрицей P . Поэтому фактически используются матрицы $\tilde{Z} = P^T \bar{Z}P$, $\tilde{W} = P^T \bar{W}P$. Перед началом обращения \bar{B} должен быть введен внутренний порядок следования узлов в каждой подобласти, что делается аналогично [6]. В остальном алгоритм распараллеливания предложенного в настоящей работе нового метода совпадает с описанным в работе [6].

5. Результаты расчетов

Предложенный в настоящей работе метод решения системы линейных алгебраических уравнений $Ax = b$, где $A = A^T > 0$, был использован для решения двумерной задачи Дирихле для уравнения Пуассона на ортогональной сетке, а также для ряда задач из Флоридской коллекции [11]. В первом случае использовалась стандартная пятиточечная аппроксимация лапласиана в единичной квадратной области расчета, где задавалась ортогональная сетка с числом неизвестных $N=4096$ (задача 1), $N=16384$ (задача 2), $N=65536$ (задача 3) $N=262144$ (задача 4), $N=1048576$ (задача 5). Для построения параллельных методов область расчетов разбивалась на квадратные подобласти с одинаковым числом узлов сетки. Внутри каждой подобласти использовался лексикографический способ упорядочения узлов сетки. Для нумерации подобластей также использовался лексикографический порядок. Программа была написана на языке FORTRAN/MPI, расчеты производились на настольном ПК Intel (R) Core (TM) 2CPU 2.13 ГГц (2Гб памяти), а также на многопроцессорной вычислительной системе MVS 100K (МСЦ РАН).

В таблицах 1-5 приведены результаты решения задачи $Ax=b$, где $b_i \equiv 1$, начальное приближение $x_0 \equiv 0$, счет продолжался до выполнения условия $\|Ax - b\| < \varepsilon \|b\|$, где $\varepsilon = 10^{-9}$. Прием Айзенштата не применялся.

В таблице 1 приведены значения числа итераций, полученные в расчетах задач 1-5 при заполненности матрицы G , отвечающей значениям параметров $q=2$ и $q=5$. Здесь в последней строке для каждой задачи приведено число итераций метода ICCG(0) и его параллельного варианта [12]. Как показывают

расчеты, с ростом q число итераций нового метода уменьшается, однако увеличивается время вычисления диагональных матриц Z, W (см. ниже). Заметим, что с точки зрения полного времени счета оптимальным является $q=2$ или $q=3$.

Таблица 1

Значения числа итераций, полученные в расчетах задач 1-5 новым методом при $q=3$ и $q=5$, методом ICCG(0) и их параллельными вариантами (P – число процессоров)

Задача	Метод	P=1	P=4	P=16	P=64	P=256	P=1024	P=4096
1: N=4096	q=3	54	65	61	63	-	-	-
	q=5	47	60	58	60	-	-	-
	ICCG(0)	58	61	64	64	-	-	-
2: N=16384	q=3	102	118	112	111	115	124	-
	q=5	88	111	102	105	107	122	-
	ICCG(0)	106	115	119	117	121	124	-
3: N= 65536	q=3	190	272	214	210	205	213	364
	q=5	171	213	193	189	194	199	238
	ICCG(0)	209	222	222	215	219	224	241
4: N=26214	q=3	341	410	407	392	388	392	396
	q=5	293	364	360	365	353	365	381
	ICCG(0)	368	440	434	411	416	425	403
5: N=104857	q=3	666	802	793	757	700	700	715
	q=5	647	-	-	-	-	-	-
	ICCG(0)	19	858	850	814	746	753	770

В ряде случаев с помощью коррекции диагонали матрицы G в сторону ее уменьшения (т.е. замены G_{ii} на θG_{ii} , где $0 < \theta < 1$) можно уменьшить число итераций. Соответствующие результаты приведены в таблице 2.

Таблица 2

Улучшенное число итераций нового метода для $q=3$, P=1, 16, 64, 256

Номер задачи	P=1, q=3	P=16, q=3	P=64, q=3	P=256, q=3
2	67 ($\theta = 0.75$)	95 ($\theta = 0.85$)	95 ($\theta = 0.85$)	102 ($\theta = 0.85$)
3	113 ($\theta = 0.75$)	173 ($\theta = 0.85$)	165 ($\theta = 0.85$)	174 ($\theta = 0.85$)
4	217 ($\theta = 0.75$)	324 ($\theta = 0.85$)	290 ($\theta = 0.83$)	300 ($\theta = 0.83$)
5	403 ($\theta = 0.75$)	596 ($\theta = 0.8$)	560 ($\theta = 0.82$)	570 ($\theta = 0.82$)

В таблице 3 приведены результаты расчетов на одном процессоре. Используются обозначения: t_1 время вычисления матриц W, Z , t_2 время итерационного процесса в новом методе, t_3 время вычисления диагональной матрицы в предобусловливателе $IC(0)$, t_4 время итерационного процесса в методе с предобусловливанием $IC(0)$, K -номер задачи, it – количество итераций.

Таблица 3

Улучшенное число итераций нового метода ($q=3$ и $q=2$) и времена счета на одном процессоре для нового метода и метода $ICCG(0)$

K	it ($q=3$)	t_1, t_2, t_1+t_2 ($q=3$)	it ($q=2$)	t_1, t_2, t_1+t_2 ($q=2$)	t_4, t_3+t_4 ($IC(0)$)
2	67 ($\theta = 0.75$)	0.67, 0.24, 0.91	77 ($\theta = 0.65$)	0.25, 0.27, 0.52	0.36, 0.36
3	113 ($\theta = 0.75$)	2.67, 1.61, 2.28	142 ($\theta = 0.63$)	1.02, 2.01, 3.03	2.95, 2.95
4	217 ($\theta = 0.75$)	10.7, 13.09, 23.8	263 ($\theta = 0.62$)	4.08, 15.94, 20.02	21.7, 21.73
5	403 ($\theta = 0.75$)	45.3, 106.7, 152.	478 ($\theta = 0.62$)	16.8, 128.5, 145.3	214.2, 214.3

Как видно из таблицы 3, за счет сокращения числа итераций в новом методе время счета итерационного процесса сильно уменьшается при увеличении q . Однако из-за увеличения затрат на вычисления W и Z суммарное время в большинстве случаев существенно не меняется. Отметим заметное сокращение времени счета по сравнению с $ICCG(0)$ для задачи 5.

В таблице 4 приведены результаты расчетов задачи 4 на 16, 64, 256 ядрах.

Таблица 4

Результаты расчетов задачи 4 на MVS 100K

Метод	P=16				P=64				P=256			
	it	t_1	$t_2(t_4)$	t_1+t_2	it	t_1	$t_2(t_4)$	t_1+t_2	it	t_1	$t_2(t_4)$	t_1+t_2
$q=3, (\theta = 0.85, 0.83)$	325	11.4	0.24	11.62	290	2.01	0.102	2.11	300	0.66	0.16	0.82
$q=2 (\theta = 0.85, 0.83)$	341	8.71	0.28	8.99	336	1.83	0.114	1.94	353	0.57	0.21	0.78
$IC(0)$	434	0.356			411	0.139			416	0.247		

Здесь t_1 – время вычисления матриц W, Z , t_2 – время итерационного процесса в новом методе, t_3 – время вычисления диагональной матрицы в

предобусловливателе $IC(0)$, t_4 – время итерационного процесса в методе $ICGG(0)$ на многопроцессорной вычислительной системе MVS 100K.

При этом на каждом вычислительном узле использовались 2 ядра из 8 доступных, см. также [13]. Время счета итерационного процесса в новом методе всегда было меньше, чем в методе $ICCG(0)$. Заметим, что с ростом числа P время вычисления W, Z продолжает падать. Можно высказать предположение, что для больших P и N новый метод в параллельном варианте будет работать быстрее, чем метод $ICCG(0)$.

В таблице 5 приведем, для сравнения, результаты из [13], полученные при расчетах задачи 5 (в 4 раза большего размера, чем задача 4) на MVS 100K методом ВПС2-CG.

Таблица 5

Результаты расчетов задачи 5 на MVS 100K методом ВПС2-CG

Число процессоров P	Число итераций	Общее время счета
1	113	33.9
16	253	4.12
60	300	1.52
200	325	1.26

Видно, что масштабируемость по числу процессоров оказывается лучше у нового метода (из-за больших затрат на вычисление W и Z и хорошей параллелизуемости этой фазы вычислений)

Ниже в таблице 6 приведены результаты расчетов ряда задач методом сопряженных градиентов с предобусловливанием $B^{-1} = G^T G$. Расчеты производились на одном процессоре. С учетом специфики предобусловливания число итераций не должно зависеть от числа процессоров.

Таблица 6

Число итераций с использованием предобусловливателя $B^{-1} = G^T G$

Номер задачи	$q=1$	$q=5$
1	96	39
2	176	73
3	329	136

При $q=5$ время вычисления предобусловливателя $B^{-1} = G^T G$ и $B = (I + LZ)W^{-1}(I + ZL^T)$ отличается на время вычисления GL , α, β, γ , диагональных матриц Z, W , что должно занять гораздо меньше времени, чем вычисление матрицы G . Число итераций в методе с $B^{-1} = G^T G$ при этом примерно в 1.2 раза меньше. В то время как число арифметических действий на

умножение матрицы $B^{-1} = G^T G$ на каждой итерации в d раз больше, где $d = 2nz(G) / (nz(A) + n)$, чем затраты на каждой итерации в предлагаемом методе. Таким образом, при большой заполненности матрицы G (например, при $q=5$) предлагаемый в настоящей работе новый метод потребует меньше времени для реализацию.

Тестирование предложенного метода производилось также с помощью решения ряда задач из Флоридской коллекции [11] с симметричными положительно определенными матрицами на одном процессоре. В таблице 7 приведен список задач, где n число неизвестных, $nz(A)$ число ненулевых элементов в матрице.

Матрицы `tmt_sym`, `s3dkt3m2` не являются М-матрицами. В таблице 8 приведены оптимальные с точки зрения времени счета результаты решения задачи $Ax=b$, где $x_i \equiv 1$, начальное приближение $x_0 \equiv 0$, счет продолжался до выполнения условия $\|Ax - b\| < \varepsilon \|b\|$, где $b = Ax_T$, $x_T = 1$, $\varepsilon = 10^{-12}$. Прием Айзенштата не применялся.

Таблица 7

**Список задач из флоридской коллекции, использованных
для тестирования**

Матрица	N	Nz(A)	Происхождение
<code>g3_circuit</code>	1585478	7660826	Моделирование интегральных схем
<code>tmt_sym</code>	726713	5080961	Моделирование задач электромагнетизма
<code>s3dkt3m2</code>	90449	3686233	Модель цилиндрической оболочки
<code>parabolic_fem</code>	525825	3674625	Уравнение диффузии-конвекции с постоянным переносом
<code>fpache2</code>	715176	4817870	Трехмерная конечно-разностная задача
<code>Ecology2</code>	999999	4995991	Приложение теории электрических цепей к генетике

В таблице 8 в скобках указано число итераций для ICCG(0), t – время счета итерационного процесса. Существенного ускорения по сравнению с предобуславливанием IC(0) использование нового метода не дает, однако новый метод имеет большую сферу применимости, для возможности его применения требуется только условие $A = A^T > 0$.

Результаты расчетов ряда задач из Флоридской коллекции новым методом на одном процессоре, $q=3$

Матрица, q	Время для W, Z	Время итераций	Число итераций (В скобках для IC(0) и время счета с IC(0))	Улучшенное число итераций В скобках θ и время счета с этим θ
g3_circuit, $q=2$	26.61	406.97	1121 (979,423.7)	1103 ($\theta = 0.99$)
tmt_sym, $q=2$	24.09	318.09	1667	1562 ($\theta = 0.95$)
s3dkt3m2, $q=1$	17.61	662.24	10090	
parabolic_fem, $q=2$	15.84	109.36	873 (910,137.2)	770($t=102.4$) ($\theta = 0.84$)
apache2, $q=2$	26.11	170.36	991 (748,146.91)	
ecology2, $q=3$	40.95	407.9	1855	1566($t=343.86$) ($\theta = 0.88$)

Произведем сравнение скорости решения первых трех задач предложенным методом с решением другими методами. Заметим, что при использовании метода J-CG (т.е. метода сопряженных градиентов с предобусловливанием $B = \text{Diag}(A)^{-1}$ $B = (\text{Diag}(A))^{-1}$ на решение задачи g3_circuit требуется 3481 итерация, на решение задачи tmt_sym требуется 5430 итераций, на решение задачи s3dkt3m2 требуется 50498 итераций [14]. При этом дополнительные расчеты на вычисление предобусловливания и его обращение не способны скомпенсировать расходы на разницу итераций метода J-CG и нового метода. Очевидно, время решения этих задач методом J-CG будет существенно больше, чем новым методом.

В таблице 9 приведены результаты расчетов ряда задач Флоридской коллекции методом сопряженных градиентов с предобусловливанием IC2 [14] на одном процессоре настольного ПК. Несмотря на значительно меньшее время счета, этот метод не может быть эффективно распараллелен. Параллельный метод ВПС2-CG (см. выше табл. 5), построенный с использованием этого предобусловливания, был описан в [13].

Хотя число итераций метода IC2 получилось меньше, однако большая заполненность предобусловливателя увеличивает время расчета каждой итерации. Сравнение времен счета итерационного процесса в новом методе и в методе IC2 показало, что времен счета итерационного процесса в новом методе больше, чем в методе IC2 для задач g3_circuit – в 3.4 раза, для Tmt_sym в 2.78 раза, для s3dkt3m2 в 6.54 раза, для Parabolic_fem в 2.29 раза, для apache2 в 2.52 раза, для ecology2 в 2.47 раза. Если применить прием Айзенштата в новом методе, то эти коэффициенты уменьшатся. Таким образом, в ряде случаев предложенный новый метод не сильно уступает по времени счета на одном процессоре методу IC2-CG, который имеет ту же область применимости.

Результаты расчетов ряда задач Флоридской коллекции методом сопряженных градиентов с предобусловливанием IC2

Матрица	Время расчета U	Время итераций	Число итераций	Относительное заполнение
g3_circuit	25.41	117.64	221	2.585
tmt_sym	11.33	122.00	496	2.043
s3dkt3m2	7.34	101.25	1711	1.009
parabolic fem	7.25	41.99	249	2.001
apache2	13.45	67.48	295	1.689
ecology2	13.28	139.64	446	2.657

В заключение следует заметить, что если решается нестационарная задача, причем матрица A не очень сильно меняется от слоя к слою, то в новом методе целесообразно использовать метод замораживания матриц Z и W , т.е. можно вычислять эти матрицы один раз на несколько временных слоев и на нескольких последующих слоях использовать эти значения. При этом целесообразно использовать достаточно большое q , например $q=5$ или $q=7$. тогда число итераций предобусловленного метода сопряженных градиентов существенно уменьшится.

Основными достоинствами предлагаемого нового метода является его широкая область применимости (требуется лишь выполнение условия (1)), возможность эффективного использования разреженности матрицы, небольшое число арифметических действий на каждой итерации (в частности, имеется возможность применения приема Айзенштата), возможность эффективного распараллеливания.

Список литературы

1. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем - М.: Мир,1991.-365с.
2. Axelsson O. A generalazed SSOR method. // BIT. 1972.V.13. - P.443-467.
3. Meijerink J. A., van der Vorst H. A. An Iterative Solution Method for Linear Systems, of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-matrix // Math. Comp. 1977. V.31. N 137. - P. 148-162.
4. Gustafsson I. A Class of First Order Factorization Methods // BIT. 1978. V.18. - P.142-156.
5. Milyukova O. Yu. Parallel approximate factorization method for solving discrete elliptic equations.// Parallel Computing. 2001. №27. - P.1365-1379.
6. Милюкова О.Ю. Некоторые параллельные итерационные методы с факторизованными матрицами предобусловливания для решения

- эллиптических уравнений на треугольных сетках // Ж. вычисл. матем. и матем. физики. 2006. Т.46. №6. - С.1096-1112.
7. Axelsson O., Kaporin I. On the sublinear and superlinear rate of convergence of conjugate gradient methods. // Numerical Algorithms. 2000. №25 – P. 1–22.
8. Kaporin I.E. New convergence results and preconditioning strategies for the conjugate gradient method.// Numer. Linear. Algebra Appls. V.1. N.2. 1994. - P.179-210.
9. Капорин И.Е. Предобусловленный метод сопряженных градиентов для решения дискретных аналогов дифференциальных задач // Дифференц. уравнения. 1990. Т. 26. № 7. - С. 1225–1236.
10. Капорин И.Е. Использование полиномов Чебышева и приближенного обратного треугольного разложения для предобусловливания метода сопряженных градиентов // Ж. Вычисл. Матем. и Матем. Физики. 2012. Т.52. № 2. С.1-26.
11. Davis T.A., Hu Y.F. University of Florida sparse matrix collection // ACM Trans. on Math. Software, 2011. V.38
(URL:<http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices>)
12. Милюкова О.Ю. Параллельные варианты некоторых итерационных методов с факторизованной матрицей предобусловливания.// Ж. вычисл. матем. и матем. физики. 2001. Т.41. №11. - С.1619-1636.
13. 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.: Из-во ВЦ РАН. 2011. - С.32-49.
14. Капорин И.Е. Использование полиномов Чебышева и приближенного обратного треугольного разложения для предобусловливания метода сопряженных градиентов // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2012. Т. 52. №2. - С.179-204.

Оглавление

1. Введение.....	3
2. Факторизованная матрица предобусловливания.....	4
3. Алгоритм метода.....	8
4. Параллельный алгоритм метода.....	8
5. Результаты расчетов.....	10
Список литературы.....	16