



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 47 за 2019 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Капорин И.Е., [Милюкова О.Ю.](#)

MPI+OpenMPI реализация
метода BiCGStab с
факторизованным явным
предобусловливателем

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Капорин И.Е., Милюкова О.Ю.
MPI+OpenMPI реализация метода BiCGStab с факторизованным явным предобусловливателем
// Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 47. 17 с. doi:[10.20948/prepr-2019-47](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-47)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-47>

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

И.Е. Капорин, О. Ю. Милюкова

**MPI+OpenMP реализация метода
BiCGStab с факторизованным явным
предобусловливателем**

Москва — 2019

Капорин И.Е., Милюкова О.Ю.

MPI+OpenMP реализация метода BiCGStab с факторизованным явным предобусловливателем

Для предобусловливания несимметричной положительно определенной разреженной матрицы рассматривается ее приближенная обратная, представленная в виде произведения нижнетреугольной и верхнетреугольной матриц. Предлагается новый способ предобусловливания положительно определенной разреженной матрицы – метод блочного Якоби неполного обратного LU разложения. Описан алгоритм параллельной реализации метода BiCGStab с предложенным предобусловливанием с применением MPI+OpenMP технологии. Проводится сравнение времени решения тестовых задач из коллекции университета Флориды методом BiCGStab с предложенным предобусловливанием и с предобусловливанием Якоби с использованием только MPI и MPI+OpenMP подходов.

Ключевые слова: итерационное решение систем линейных уравнений, разреженные матрицы, неполное обратное треугольное разложение, параллельное предобусловливание, стабилизированный метод бисопряженных градиентов

Igor Evgenievich Kaporin, Olga Yurievna Milyukova

MPI+OpenMP implementation of BiCGStab method with factorized explicit preconditioner

A preconditioner for large sparse nonsymmetric positive definite coefficient matrix is considered based on its approximate inverse in the form of product of a lower triangular sparse matrix by an upper triangular matrix. For the class of matrices considered, a new preconditioning based on approximate block Jacobi with incomplete inverse LU-factorization preconditioning is proposed. For parallel implementation of the corresponding preconditioned BiCGStab algorithm, the MPI+OpenMP techniques were used. Comparative timing results for the MPI+OpenMP and MPI implementations of the proposed preconditioning and the Jacobi preconditioning used with the BiCGStab for several test problems from the University of Florida sparse matrix collection are presented.

Keywords: iterative solution of linear systems, sparse matrices, incomplete inverse triangular factorization, parallel preconditioning, BiCGStab method

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (номера проектов 17-01-00973-а, 18-07-00841-а, 19-01-00666).

1. Введение

Рассмотрим задачу приближенного решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$Ax = b \quad (1.1)$$

с положительно определенной разреженной матрицей A общего вида.

Проблема построения соответствующих эффективных численных методов решения СЛАУ (1.1) сохраняет свою актуальность, так как во многих важных прикладных областях продолжают возникать новые постановки таких задач. При этом сохраняется тенденция к росту размера матриц n , увеличению их заполненности ненулевыми элементами. Решение задач с матрицами большого размера требует применения параллельных компьютеров.

В настоящей работе¹ для решения СЛАУ (1.1) большого размера используется предобусловленный стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGStab) с явными предобусловливателями, итерации которого осуществляются до выполнения условия

$$\|Mr_k\| \leq \varepsilon \|Mr_0\|, \quad 0 < \varepsilon \ll 1, \quad (1.2)$$

где $r_k = b - Ax_k$. Здесь и далее $M \approx A^{-1}$ – матрица явного предобусловливания. Будут рассмотрены итерационные методы решения задачи (1.1) с положительно определенной матрицей, использующие матрицу предобусловливания $M \approx A^{-1}$, где $M = H^T G$, G, H – нижнетреугольные матрицы с ненулевой диагональю. Такое предобусловливание сокращенно будем называть ИЛУ (Incomplete LU-factorization). В методе ИЛУ-BiCGStab значительная доля вычислительной работы приходится на повторные умножения разреженной матрицы на вектор, а операции решения систем с треугольными матрицами отсутствуют. Поэтому реализующие его алгоритмы хорошо приспособлены к параллельной реализации с использованием MPI+OpenMP подхода.

В работах [1-5] для предобусловливания симметричной положительно определенной разреженной матрицы использовались ее приближенные обратные матрицы, представленные в виде произведения двух взаимно сопряженных разреженных треугольных матриц. В работах [3-5] предложен новый метод предобусловливания – метод блочного Якоби неполного обратного треугольного разложения, а работах [4,5] – способ параллельной реализации метода сопряженных градиентов с некоторыми явными предобусловливателями с использованием MPI+OpenMP подхода. Расчеты рассмотренных тестовых задач из коллекции университета Флориды [6] показали, что использование OpenMP технологии при параллельной реализации

¹ Работа выполнена в Институте прикладной математики имени М. В. Келдыша РАН и в Вычислительном центре им. А.А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН.

этих методов позволяет значительно ускорить вычисления при решении задач с достаточно большими разреженными матрицами на умеренном числе процессоров.

В формуле (1.1) предполагается, что матрица A уже переупорядочена и отмасштабирована, $A = A_{SP} = D_L A_P D_R = D_L P \tilde{A} P^T D_R$, где P – матрица перестановки, а \tilde{A} представляет собой матрицу коэффициентов исходной задачи после симметризации структуры разреженности (дополнения нулевыми значениями в соответствующих позициях). Можно использовать переупорядочения, применяемые для симметричных матриц. В настоящей работе применяются переупорядочения, уменьшающие среднюю ширину ленты матрицы, предложенные в работах [3], [7], являющиеся обобщением упорядочения [8]. Подход, предложенный в этих работах, позволяет одновременно произвести разбиение области расчета на подобласти. В настоящей работе выполняется двухстороннее масштабирование: $A_{SP} = D_L A_P D_R$ такое, что L_1 норма всех строк и столбцов A_{SP} – становится близка к единице, с использованием алгоритма [9]. Здесь D_L, D_R – диагональные матрицы. Заметим, что искомое решение первоначальной СЛАУ $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$, где заданный вектор правой части $\tilde{b} = P^T D_L^{-1} b$, имеет вид: $\tilde{x} = P^T D_R x$.

В настоящей работе мы используем предобусловливание положительно определенной матрицы A посредством неполного обратного треугольного разложения [10]

$$A = G^{-1} H^{-T} + Z,$$

предобусловливатель имеет вид

$$H^T G \approx A^{-1}. \quad (1.3)$$

Здесь G, H – разреженные нижние треугольные матрицы. Структуру разреженности этих матриц можно выбирать, например, совпадающей со структурой разреженности нижнетреугольной части матрицы A (или содержащейся в ней).

В настоящей работе мы предлагаем новый способ предобусловливания положительно определенной разреженной матрицы, в котором используется предобусловливание блочного Якоби, а для каждого блока предобусловливания блочного Якоби, соответствующего вычислениям на своем процессоре, используется предобусловливание, предложенное в работе [10]. Заметим, что если матрица $A_{SP} = A$ положительно определена, то матрицы, являющиеся блоками на главной диагонали, т.е. подматрицы блочного предобусловливания, также являются положительно определенными. Такое предобусловливание сокращенно будем называть ВЖЛУ. При построении

этого предобусловливателя и при его обращении не требуется выполнять обмен информацией между процессорами.

В недавней статье [11] (см. также цитированную там литературу) предлагается способ решения СЛАУ с несимметричной матрицей, который позволяет использовать MPI+OpenMP технологии для реализации алгоритма. В [11] представлено предобусловливание, основанное на ILU-разложении матрицы коэффициентов с последующим построением приближенных обратных для соответствующих нижнего и верхнего треугольных сомножителей.

Итак, в настоящей работе описывается метод предобусловливания положительно определенной разреженной матрицы ILU. Предлагается новый метод предобусловливания положительно определенной разреженной матрицы ВJILU. Проводится теоретическое исследование сходимости итераций при использовании ВJ (блочного Якоби) предобусловливания положительно определенных матриц. Описывается алгоритм параллельной реализации метода ВJILU-BiCGStab с применением технологии MPI+OpenMP. Проводится сравнение времени решения тестовых задач из коллекции университета Флориды с использованием только MPI и MPI+OpenMP подходов предложенным новым методом ВJILU-BiCGStab и методом с предобусловливанием Якоби (J-BiCGStab), в котором $M = D_A^{-1}$, где D_A – диагональная часть матрицы A .

2. Предобусловленный стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGStab)

Пусть требуется решить СЛАУ (1.1), и для положительно определенной матрицы A построена приближенная обратная вида (1.3). Алгоритм метода BiCGStab [12] с левым предобусловливанием $M = H^T G$ можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 & x_0 = 0, \quad r_0 = H^T G b, \quad p_1 = r_0, \\
 & \text{for } i = 1, \dots, i_{\max} \text{ do} \\
 & \quad \rho_{i-1} = r_0^T r_{i-1}, \\
 & \quad \text{if } (i > 1) \text{ then} \\
 & \quad \quad \beta_{i-1} = \frac{\rho_{i-1} \alpha_{i-1}}{\rho_{i-2} \omega_{i-1}}, \\
 & \quad \quad p_i = r_{i-1} + (p_{i-1} - v_{i-1} \omega_{i-1}) \beta_{i-1}, \\
 & \quad \text{end if} \\
 & \quad v_i = H^T G A p_i, \\
 & \quad \alpha_i = \rho_{i-1} / r_0^T v_i, \\
 & \quad x_{i-1/2} = x_{i-1} + p_i \alpha_i,
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

$$\begin{aligned}
r_{i-1/2} &= r_{i-1} - v_i \alpha_i, \\
s_i &= H^T G A r_{i-1/2}, \\
\omega_i &= s_i^T r_{i-1/2} / s_i^T s_i, \\
x_i &= x_{i-1/2} + r_{i-1/2} \omega_i, \\
r_i &= r_{i-1/2} - s_i \omega_i, \\
\text{проверка на сходимость: } &\|r_k\| \leq \varepsilon \|r_0\|, \\
\text{end for,}
\end{aligned}$$

где $0 < \varepsilon \ll 1$, $r_k = H^T G(b - Ax_k)$. Оценки сходимости метода BiCGStab можно найти в [13], см. также цитированные там источники. Метод может требовать числа итераций примерно до 2 раз более, чем GMRES (обобщенный метод минимальных невязок) [14], однако минимальные затраты на векторные операции делают его одним из наиболее конкурентоспособных итерационных решателей для несимметричных систем уравнений. Алгоритм (2.1) использует лишь операции умножения разреженных матриц на вектор, операции вычисления скалярных произведений и элементарные векторные операции. Поэтому принципиальная возможность его эффективной параллельной реализации с использованием MPI+OpenMP подхода не вызывает сомнений даже в случае большого числа процессоров.

3. Неполное обратное разложение положительно определенных матриц

Опишем алгоритм построения нижнетреугольных невырожденных матриц G, H , впервые представленный в работе [10]. Здесь и далее предположим, что матрицы $G, H \in \Omega$, где Ω – множество нижнетреугольных разреженных матриц, ненулевые элементы которых могут быть расположены только в позициях $(i, j_i(p))$, где $1 \leq j_i(1) < \dots < j_i(m) = i$, $i=1,2,\dots,n$. Вводя ортопроекторы $P_i = \sum_{p=1}^{m_i} e_{j_i(p)} e_{j_i(p)}^T$, где e_k – k -ый столбец единичной матрицы I , и определив матрицы

$$A_i = I - P_i + P_i A P_i, \quad i=1,\dots,n,$$

положим строки $g_i^T = e_i^T G$ матрицы G и столбцы $h_i = H^T e_i$ матрицы H^T равными

$$g_i^T = (e_i^T A_i^{-1} e_i)^{-1/2} e_i^T A_i^{-1}, \quad h_i = A_i^{-1} e_i (e_i^T A_i^{-1} e_i)^{-1/2}.$$

Рассмотрим вопрос о возможной близости матрицы $G^{-1} H^{-T}$ к матрице A . Обозначим $\|R\| = \sqrt{\text{tr } R^T R}$ евклидову норму матрицы R . Можно показать [10], что среди всех матриц $A(L_1, L_2) = G^{-1} H^{-T} + G^T L_1 + L_2^T H$, где $L_1, L_2 \in \Omega$,

ближайшей в евклидовой норме к A является именно построенная выше матрица $A(0,0) = G^{-1}H^{-T}$.

Кроме того, если наложить специальное условие на структуру разреженности матриц G, H , а именно, потребовать, чтобы $\Omega + \Omega^T = \Omega^T \Omega$, где $\Omega + \Omega^T$ и $\Omega^T \Omega$ – множества матриц вида $L_1 + L_2^T$ и $L_2^T L_1$ соответственно, где $L_1, L_2 \in \Omega$, то справедливы равенства $(A)_{ij} = (G^{-1}H^{-T})_{ij}$, где (i, j) – позиция любого ненулевого элемента матрицы из $\Omega + \Omega^T = \Omega^T \Omega$. Заметим, что условие $\Omega + \Omega^T = \Omega^T \Omega$ эквивалентно требованию отсутствия заполнения при выполнении разреженного исключения Гаусса над любой матрицей из $\Omega + \Omega^T$ в инверсном порядке.

Итак, $g_i = hA_i^{-T}e_i$, $h_i = hA_i^{-1}e_i$, где $h = (e_i^T A_i^{-1}e_i)^{-1/2}$, то есть g_i с точностью до множителя совпадает с последним столбцом матрицы A_i^{-T} , а h_i – с точностью до множителя с последним столбцом матрицы A_i^{-1} . Учитывая, что $A_i A_i^{-1} = I$, а $A_i^T A_i^{-T} = I$, получим, что вектор $\tilde{h}_i = h_i / h$ находится из решения системы $A_i \tilde{h}_i = e_i$, а вектор $\tilde{g}_i = g_i / h$ находится из решения системы $A_i^T \tilde{g}_i = e_i$.

$h = 1 / \sqrt{(e_i^T A_i^{-1}e_i)}$, где $(e_i^T A_i^{-1}e_i)$ – элемент в позиции (i, i) матрицы A_i^{-1} . Можно показать, что для каждого i для вычисления строки g_i^T матрицы G и строки h_i^T матрицы H придется решать 2 системы уравнений размера $m_i \times m_i$ с правой частью – вектором длины m_i вида $(0, 0, \dots, 0, 1)^T$, и с матрицами L_i и U_i соответственно, где $A_i = P_i^T L_i U_i P_i$ – треугольное разложение матрицы A_i , P_i – матрицы перестановок. Для вычисления последнего, если это целесообразно, можно использовать имеющуюся разреженность подматриц A_i , см. напр. [15]. Более того, можно применять разложения вида $A_i = P_i^T L_i U_i P_i$, где матрица перестановки оставляет на месте замыкающую диагональную позицию, а в остальном может выбираться из условия минимума затрат на треугольную факторизацию. Тогда для вычисления каждой из строк g_i^T матрицы G и строки h_i^T матрицы H достаточно решения системы уравнений с одной из треугольных матриц L_i или U_i , соответственно.

4. Предобусловливание при помощи блочного метода

Якоби в сочетании с неполным обратным разложением

Пусть матрица A отмасштабирована, переупорядочена и разбита на блоки, причем на блочной диагонали расположены p квадратных блоков размера n_s , $1 \leq s \leq p$, $\sum_1^p n_s = n$. Обозначим $k_s = n_1 + \dots + n_s$. Определим прямоугольные матрицы

$$W_s = \left[e_{k_{s-1}+1} \mid \dots \mid e_{k_s} \right],$$

столбцы которых являются единичными n -векторами, $k_{s-1} + 1, \dots, k_s$ представляют собой индексы s -го блока. Рассмотрим матрицы размерами $n_s \times n_s$ вида $W_s^T A W_s = A_s$, где $s=1, \dots, p$, являющиеся диагональными блоками матрицы A . Построим неполные обратные треугольные разложения для этих матриц: $H_s^T G_s \approx A_s^{-1}$. В качестве предобусловливателя будем использовать

$$M = \sum_{s=1}^p W_s H_s^T G_s W_s^T \approx (\text{BlockDiag}(A))^{-1}. \quad (4.1)$$

Предобусловливание (4.1) будем называть «блочное Якоби – неполное обратное треугольное разложение» (ВЖЛУ). Вычисление элементов матриц G_s, H_s ($s=1, \dots, p$) осуществляется аналогично описанному в разделе 3, где вместо матрицы A используются матрицы A_s .

Заметим, что «точное» блочное Якоби предобусловливание имеет следующий вид: $H = \sum_{s=1}^p W_s A_s^{-1} W_s^T$.

5. Сходимость итераций при ВЖ-предобусловливании положительно определенных матриц

Мы предполагаем, что матрица A предварительно симметрично переупорядочена и отмасштабирована подходящим образом (см. выше). Напомним, что ВЖ-предобусловливание получается при использовании обратной к матрице $B = \text{BlockDiag}(A)$, получаемой удалением всех блочно-внедиагональных элементов из матрицы A .

Предположим, что матрица A является положительно определенной, т. е.

$$A_0 = \frac{A + A^T}{2} > 0.$$

В этом случае, очевидно, положительно определенной является также и матрица B , т. е.

$$B_0 = \frac{B + B^T}{2} > 0.$$

Тогда, согласно основному результату работы [16], имеет место локализация спектра матрицы $B^{-1}A$, обеспечивающая сходимость предобусловленного

метода GMRES, а тогда и метода BiCGStab [13]. В частности, для невязок $r_k = b - Ax_k$ показано, что если величина

$$\gamma = \frac{1}{4} \|A_0^{-1/2}(B - A)B_0^{-1/2}\|^2$$

удовлетворяет условию $0 < \gamma < 2.261$, то справедлива оценка

$$\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} \leq \text{const} \cdot \left(\frac{4\xi}{1 + 3\xi^2 + 5\xi^4} \right)^k, \text{ где } \xi = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\gamma}{1 + \gamma}}.$$

Видно, что оценка скорости сходимости имеет тенденцию к улучшению при уменьшении величины нормы $\|A - B\|$ блочно-внедиагональной части матрицы A . Таким образом, если матрица A несильно отличается от B , можно ожидать, что ВJ-предобусловливание будет достаточно эффективным.

Незначительное отличие матрицы B от A может иметь место при достаточно хорошем блочном разбиении A , когда вне блочной диагонали оказывается не слишком много ненулевых элементов A , и они сравнительно невелики по модулю. В настоящей работе используется разбиение [3], при котором количество ненулевых элементов вне блочной диагонали относительно невелико.

Следует отметить, что замена точного обращения диагональных блоков, образующих матрицу B , на их приближения по алгоритму ИЛУ соответствует замене ВJ-предобусловливателя B на соответствующее приближение \tilde{B} и может привести к некоторому увеличению γ . Тем не менее, при достаточно хорошем качестве таких приближений можно рассчитывать на сходимость итераций метода BiCGStab в случае положительной определенности матриц A и сохранения этого свойства для \tilde{B} .

Заметим, что если диагональные элементы положительно определенной матрицы A недостаточно велики относительно внедиагональных элементов, то возможны случаи, когда ИЛУ-предобусловленная матрица $M = GAH^T$ уже не является положительно определенной и непосредственное использование результатов [16] невозможно. В качестве примера можно рассмотреть матрицу 3-го порядка

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a & 0 \\ -a & 1 & a \\ 0 & -a & 1 \end{bmatrix},$$

где a – произвольное вещественное число. Матрица A является положительно определенной, так как $A_0 = (A + A^T) / 2 = I_3$. Неполные обратные множители ИЛУ-разложения для этой матрицы имеют вид

$$G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a(1+a^2)^{-1/2} & (1+a^2)^{-1/2} & 0 \\ 0 & a(1+a^2)^{-1/2} & (1+a^2)^{-1/2} \end{bmatrix}, H^T = \begin{bmatrix} 1 & -a(1+a^2)^{-1/2} & 0 \\ 0 & (1+a^2)^{-1/2} & -a(1+a^2)^{-1/2} \\ 0 & 0 & (1+a^2)^{-1/2} \end{bmatrix},$$

а преобусловленная матрица равна

$$M = GAH^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -a^2(1+a^2)^{-1/2} \\ 0 & 1 & -a^3(1+a^2)^{-1} \\ -a^2(1+a^2)^{-1/2} & a^3(1+a^2)^{-1} & 1 \end{bmatrix}.$$

Отсюда получаем выражение для симметричной части преобусловленной матрицы

$$M_0 = (M + M^T) / 2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -a^2(1+a^2)^{-1/2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -a^2(1+a^2)^{-1/2} & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

все собственные значения которой положительны только при условии $a^2 < \sqrt{1+a^2}$. Преобразуя последнее в виде квадратичного неравенства, приходим к выводу, что при всех a , таких, что $|a| \geq \sqrt{0.5(1+\sqrt{5})} \approx 1.27202$, матрица M , полученная в результате ИЛУ-преобусловливания матрицы A , не является положительно определенной. С другой стороны, невыполнение достаточных условий, использованных в [16], еще не означает, что применение преобусловливания сильно ухудшило свойства матрицы. Так, для рассмотренного примера собственными значениями матрицы A являются числа 1 , $1 \pm ia\sqrt{2}$, а для преобусловленной матрицы получаем вещественный спектр $1/(1+a^2)$, 1 , $(1+2a^2)/(1+a^2)$, расположенный на положительной полуоси, что можно считать улучшением с точки зрения использования итерационных методов.

6. Алгоритм параллельной реализации

При построении преобусловливателя в каждом процессоре с номером $s=1, \dots, p$ будем строить матрицы G_s, H_s , содержащие соответствующие n_s строк матриц G, H . Сначала в каждом процессоре создадим матрицы $W_s^T A W_s = A_s$ размера $n_s \times n_s$, которые будут содержать все элементы матрицы A , необходимые для построения всех строк матриц G_s, H_s . При вычислении в каждом процессоре матриц G_s, H_s не требуется информации, хранящейся в других процессорах, вычисление этих матриц происходит одновременно во

всех процессорах. Кроме того, каждая строка матриц G_s, H_s вычисляется независимо от других строк этих матриц с использованием OpenMP технологии. Для распределения вычисления значений элементов матриц G_s, H_s по строкам используются простые циклы с опцией **schedule (static)**, задающей, каким образом итерации цикла распределяются по нитям. Заметим, что, как показали расчеты тестовых задач, использование опций **schedule (dynamic)** **schedule (guided)** не привело к существенному ускорению расчетов. Затем во всех процессорах одновременно вычисляются матрицы H_s^T . Как показывают расчеты задач, приведенные в [4], построение транспонированной матрицы занимает ничтожно малое время по сравнению с временем вычисления предобусловливателя и выполнением итерационного процесса метода ПС-CG (неполного обратного треугольного разложения сопряженных градиентов).

При параллельной реализации вычислений $z = H^T Gr$ все процессоры выполняют работу одновременно и независимо, пересылок не требуется. При этом в каждом процессоре с номером s вычисляются $z_s = H_s^T G_s r_s$ в 2 этапа: $\tilde{z}_s = G_s r_s$, $z_s = H_s^T \tilde{z}_s$. Для распределения вычисления значений элементов векторов \tilde{z}_s, z_s по строкам i используется директива **do** с опцией **schedule static**.

Матрица A хранится в памяти в CRS формате [15], содержит верхнюю и нижнюю треугольные части. Параллельная реализация умножения матрицы на вектор в этом случае хорошо известна. Остальные этапы параллельной реализации предобусловленного метода BiCGStab также хорошо известны и не представляют труда.

Заметим, что алгоритм параллельной реализации метода VJPLU-BiCGStab аналогичен алгоритму параллельной реализации VJIC-CG [5].

7. Результаты расчетов

Все программы, реализующие использование методов VJPLU-BiCGStab, и J-BiCGStab для решения системы уравнений $Ax = b$, где A – положительно определенная матрица, были написаны на языке FORTRAN с использованием MPI+OpenMP, расчеты производились на многопроцессорном вычислительном кластере K60, установленном в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Для тестирования рассматриваемых параллельных методов использовались некоторые матрицы из коллекции университета Флориды [6]. Перечислим имена используемых тестовых матриц и укажем источник их происхождения:

tmt_unsm – моделирование электромагнитной задачи;

xenon2 – моделирование упругих свойств сложного кристаллического соединения;

sme3dc – моделирование трехмерной конструкции;

sme3db – моделирование трехмерной конструкции.

В таблице 1 приведены некоторые свойства этих матриц, NZA – число ненулевых элементов матрицы A , nz_{\min} , nz_{\max} – минимальное и максимальное число ненулевых элементов в строках матрицы A .

Решалось уравнение (1.1), где правая часть $b = 1$. Начальное приближение $x_0 \equiv 0$, счет продолжался до выполнения условия (1.2), где $\varepsilon = 10^{-8}$. Для разбиения области расчета использовался способ [3] с 4 итерациями.

Таблица 1

Свойства некоторых матриц из Флоридской коллекции

Матрица	N	NZA	nz_{\min}	nz_{\max}
tmt_unsm	917825	4584801	3	5
xenon2	157464	3866688	1	27
sme3dc	42930	3148656	24	405
sme3db	29067	2081063	24	345

В таблицах 2, 3 приведены числа итераций и времена счета задач на p процессорах (в секундах) методом J-BiCGStab, состоящие из времени счета итерационного процесса, и BJILU-BiCGStab, состоящие из времени счета предобусловливателя и времени счета итерационного процесса. В скобках приведено число нитей, при котором время счета было минимальным. В первой и третьей строках приведены результаты расчетов при использовании только MPI. На рисунках 1-4 приведены графики (в логарифмическом масштабе) зависимости времени счета рассматриваемых задач методами BJILU-BiCGStab и J-BiCGStab от числа процессоров с применением только MPI (сплошные линии) и MPI+OpenMP подходов (пунктирные линии).

Таблица 2

Числа итераций и времена счета тестовых задач разными методами на p процессорах с использованием только MPI и MPI+OpenMP подходов при оптимальном числе нитей

P	8	16	32	64
tmt-unsm	12224, 58.92	12282, 29.57	13060, 14.07	13060, 7.07
J-BiCGStab	8832, 23.25(4)	7904, 19.65(8)	9400, 12.45(8)	11240, 8.15(4)
BJILU-BiCGStab	6100, 48.98	4978, 20.44	5070, 12.04	4944, 4.89
	5242, 19.48(4)	4696, 17.76(8)	5252, 13.4(4)	4706, 5.32(4)
xenon2	2218, 4.05	2304, 2.29	2562, 1.47	2336, 0.722
J-BiCGStab	1898, 1.90(4)	1790, 1.96(4)	1852, 1.31(4)	2042, 0.853(4)
BJILU-BiCGStab	720, 3.13	778, 1.8	754, 0.977	730, 0.461
	628, 1.50(4)	652, 1.57(8)	720, 0.976(4)	732, 0.523(4)

Таблица 3

**Числа итераций и времена счета тестовых задач разными методами
на p процессорах с использованием только MPI и MPI+OpenMP подходов
при оптимальном числе нитей**

P	8	15V14	19	36
sme3dc	18796, 27.95	14812, 11.83	10440, 7.66	18580, 9.33
J-BiCGStab	10336, 8.56(8)	12496, 10.93(4)	12530, 10.46(4)	8354, 6.15(8)
VJILU- BiCGStab	5488, 19.94 3576, 6.16(8)	4874, 9.32 3800, 7.39(16)	4494, 7.88 3816,6.8(4)	5948, 6.5 3468, 4.81(8)
sme3db	14974, 15.54	7080, 5.57	7674, 4.46	14038, 5.44
J-BiCGStab	8576, 5.1(8)	5678, 2.75(4)	6018, 4.01(4)	6360, 3.62(8)
VJILU- BiCGStab	2398, 7.50 2182, 3.77(16)	4320, 8.74 2530, 3.26(4)	3398, 5.17 2654, 4.01(4)	3692, 3.23 3408, 3.36(5)

При использовании метода VJILU-BiCGStab для решения задач может наблюдаться некоторый (не всегда монотонный) рост числа итераций с ростом числа процессоров. Немонотонность роста числа итераций, возможно, связана с особенностями разбиения области. Кроме того, наблюдалось изменение числа итераций при использовании нитей и от запуска к запуску, что объясняется погрешностями вычислений.

Как видно из таблиц 2, 3, использование предобусловливания VJILU позволяет существенно уменьшить число итераций по сравнению с расчетами с предобусловливателем J. С другой стороны, обращение предобусловливателя VJILU на каждой итерации, а в ряде случаев и его построение, занимает немало времени, что может увеличить время счета. Как видно из таблиц и рисунков, при использовании только MPI метод BiCGStab с предобусловливанием VJILU в большинстве случаев считает быстрее, чем с предобусловливанием Якоби.

Как видно из таблицы 2 и рис. 1-2, 3-4, использование OpenMP технологии при решении задач с матрицами **tmt_unsm**, **xenon2** методом VJILU-BiCGStab приводит к ускорению счета на K60 при использовании менее 32 процессоров, в случае решения задачи с матрицей **sme3dc** – при использовании до 36 процессоров, а с матрицей **sme3db** – менее 36 процессоров. Использование OpenMP технологии при решении задач с матрицами **tmt_unsm**, **xenon2** методом J-BiCGStab приводит к ускорению счета на K60 при использовании менее 64 процессоров, в случае решения задач с матрицами **sme3dc**, **sme3db** до 36 процессоров. Однако при решении задачи с матрицей **sme3dc** на 19 процессорах ускорения не наблюдалось (что связано с неожиданным и возможным увеличением числа итераций при использовании нитей).

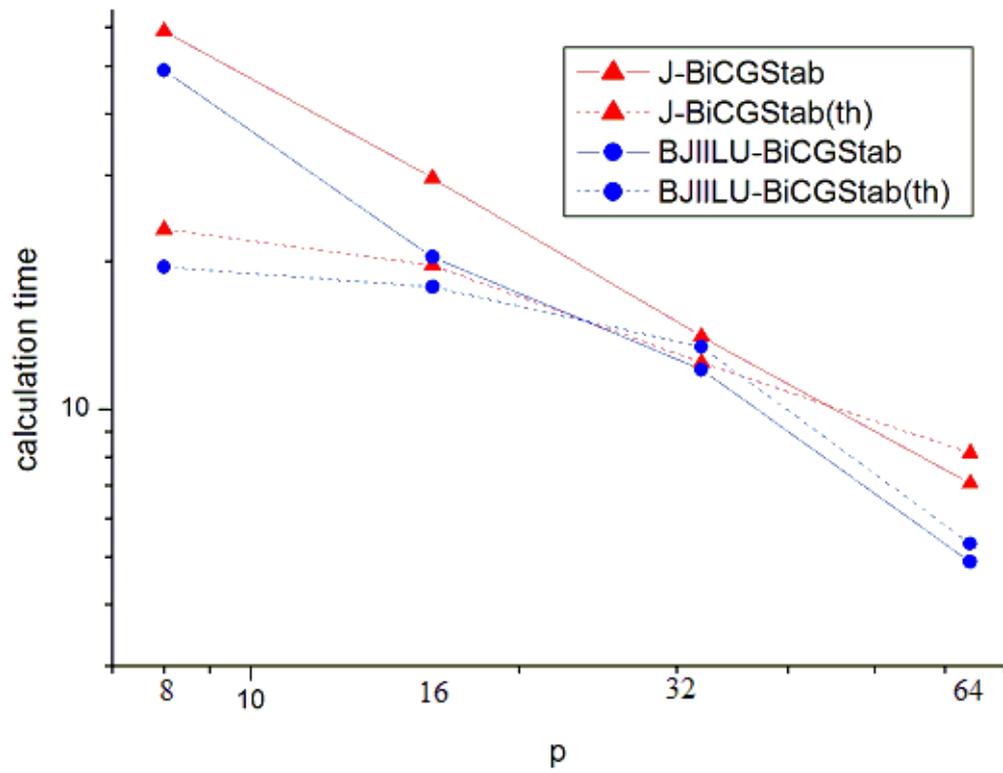


Рис. 1. Времена счета задачи с матрицей **tmt_unsm**

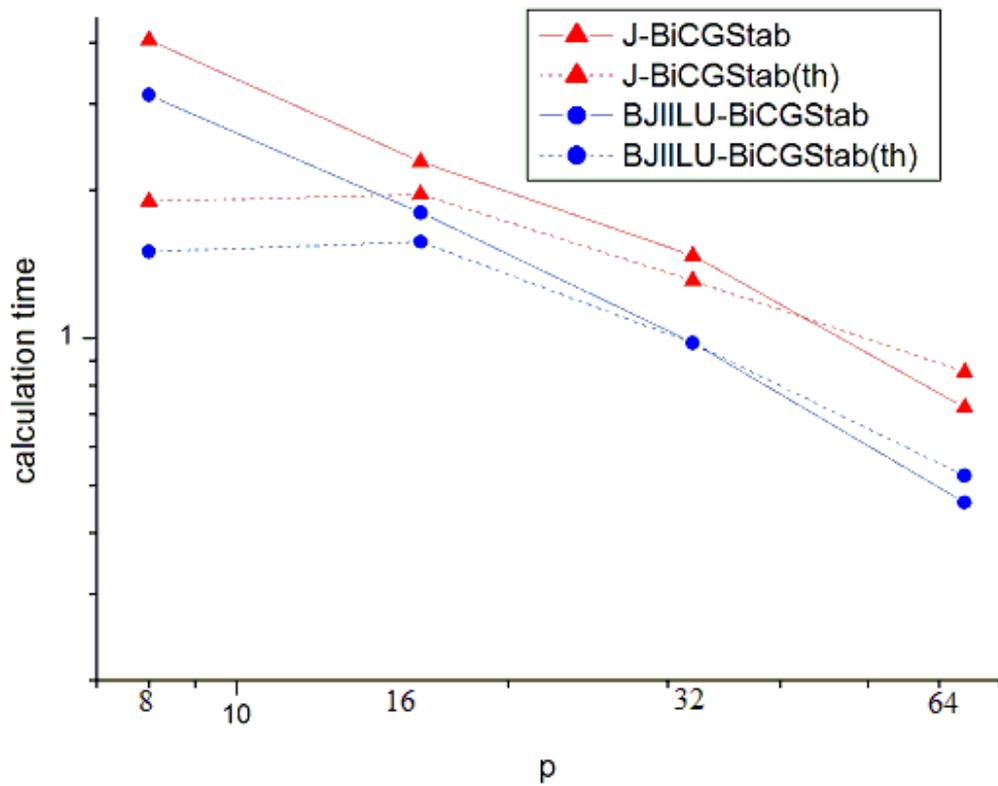


Рис. 2. Времена счета задачи с матрицей **xenon2**

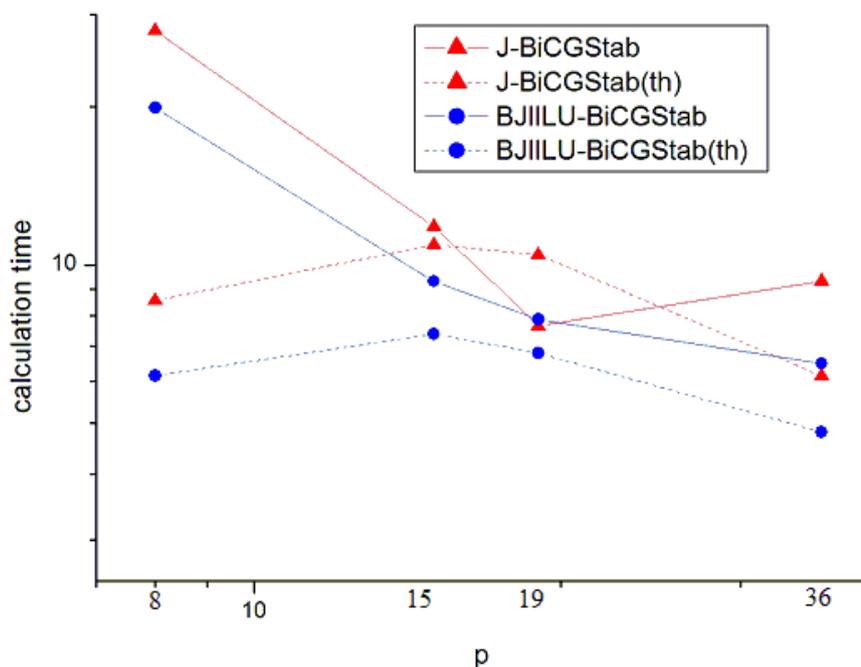


Рис. 3. Времена счета задачи с матрицей **sme3dc**

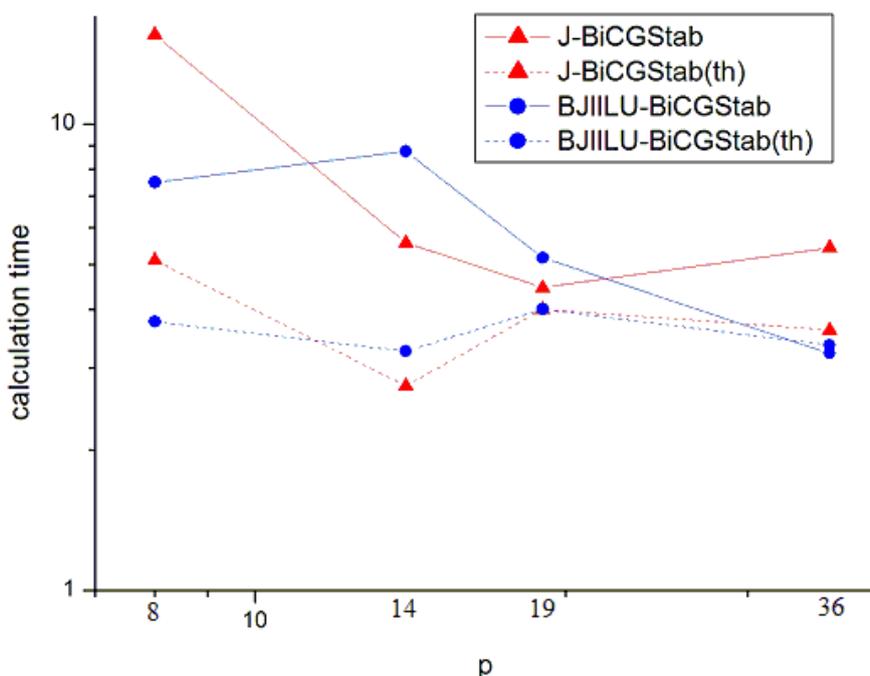


Рис. 4. Времена счета задачи с матрицей **sme3db**

Уменьшение эффекта от использования OpenMP технологии с увеличением числа процессоров (см. рис.1, 2) объясняется уменьшением числа строк матрицы, приходящихся на каждый процессор. Заметим, что в настоящей работе в качестве тестовых матриц использовались матрицы относительно небольшого размера. При расчетах реальных физических задач размеры матриц, как правило, значительно больше. Следует ожидать, что потеря эффективности от использования OpenMP технологии наступит при значительно большем числе процессоров.

Как видно из рисунков 1-4, в подавляющем большинстве случаев решение выбранных тестовых задач методом ВЖЛУ-BiCGStab с использованием MPI+OpenMP подхода на многопроцессорном вычислительном кластере K60 происходило быстрее, чем методом J-BiCGStab.

Итак, в настоящей работе рассмотрен метод предобусловливания ИЛУ, предложен новый метод предобусловливания ВЖЛУ. Предложен способ параллельной реализации метода ВЖЛУ-BiCGStab с использованием MPI+OpenMP подхода. Расчеты ряда тестовых задач из коллекции университета Флориды показали, что использование OpenMP технологии при решении задач методом ВЖЛУ-BiCGStab позволяет ускорить вычисления для не слишком большого числа процессоров.

Список литературы

1. Капорин И.Е. Предобусловленный метод сопряженных градиентов для решения дискретных аналогов дифференциальных задач // Дифференц. ур-ния. 1990. Т. 26. №7. - С.1225-1236.
2. Kaporin I.E. New convergence results and preconditioning strategies for the conjugate gradient method // Numer. Linear Algebra Appls. 1994. V.1. - P.179-210.
3. Капорин И.Е., Милюкова О.Ю. Неполное обратное треугольное разложение в параллельных алгоритмах предобусловленного метода сопряженных градиентов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 37. 28 с. doi:10.20948/prepr-2017-37
4. Капорин И.Е., Милюкова О.Ю. MPI+OpenMP параллельная реализация метода сопряженных градиентов с некоторыми явными предобусловливателями // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 8. 28 с. doi:10.20948/prepr-2018-8
5. Капорин И.Е., Милюкова О.Ю. MPI+OpenMP реализация метода сопряженных градиентов с факторизованными явными предобусловливателями // ВАНТ. Серия Математическое моделирование физических процессов. 2018. Вып.4. С. 57-69.
6. Davis T.A., Hu Y.F. University of Florida sparse matrix collection // ACM Trans. on Math.~Software. 2011. V.~38, N.1. <https://sparse.tamu.edu>
7. 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. 132-157.
8. Kaporin I.E. Reordering and splitting of sparse matrices into overlapping blocks for massively parallel preconditioning of iterative methods // Presented at NUMGRID-2012, A.A. Dorodnicyn Computing Center RAS, Moscow, Dec.17-18, 2012.
9. Knight P. The Sinkhorn-Knopp algorithm: convergence and applications. SIAM J. Matrix. Anal. Appl. 2008. V. 30. P.261-275.

10. Капорин И.Е. Итерационное решение систем линейных уравнений с использованием неполной обратной треугольной факторизации // В кн.: Прямые и обратные задачи математической физики. М.: Изд-во МГУ. 1991. С.71-77.
11. Anzt H., Huckle T.K., Brackle J., Dongarra J. Incomplete Sparse Approximate Inverses for Parallel Preconditioning // *Parallel Computing*. 2018. V.71 –P.1–22.
12. Van der Vorst H.A. Bi-CGStab: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems // *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* 1992. V.13. P.631–644.
13. Chan T. F., Szeto T. Composite step product methods for solving nonsymmetric linear systems // *SIAM Journal on Scientific Computing*. – 1996. – Т. 17. – №. 6. – С. 1491-1508.
14. Saad Y., Schultz M.H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric systems of linear equations // *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 1986. V.7. p. 856-869.
15. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений — М: Мир, 1984.
16. Капорин И.Е. Локализация собственных значений пучка положительно определенных матриц // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2008, Т.48, № 11. С. 1923–1931.

Оглавление

1. Введение.....	3
2. Предобусловленный стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGStab).....	5
3. Неполное обратное разложение положительно определенных матриц.....	6
4. Предобусловливание при помощи блочного метода Якоби в сочетании с неполным обратным разложением.....	7
5. Сходимость итераций при блочном предобусловливании Якоби положительно определенных матриц.....	8
6. Алгоритм параллельной реализации.....	10
7. Результаты расчетов.....	11
Список литературы.....	16