

Я. Л. Гурьева, В. П. Ильин

## О НЕКОТОРЫХ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ МЕТОДАХ И ТЕХНОЛОГИЯХ ДЕКОМПОЗИЦИИ ОБЛАСТЕЙ

### §1. ВВЕДЕНИЕ

Построение параллельных алгоритмов итерационного решения сеточных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), возникающих из конечно-элементных или конечно-объемных аппроксимаций сеточных краевых задач, базируется на декомпозиции расчетной области и представляет собой многогранную математическую и технологическую проблему. С одной стороны, требуется обеспечить высокую скорость сходимости применяемого итерационного процесса, для чего существует большое количество алгоритмических подходов. А с другой стороны, итоговая производительность вычислительного инструмента в значительной степени определяется формируемой структурой данных и программной реализацией кода на многопроцессорной вычислительной системе (МВС), см. [1].

Целью данной работы является экспериментальное исследование влияния на масштабируемость распараллеливания трех алгоритмических факторов: размера пересечений смежных подобластей, типа итерируемых краевых условий на их внутренних границах, а также эффективности применения методов агрегации, или грубосеточной коррекции [2]. При этом в качестве методического полигона выбрано относительно простое, но достаточно представительное семейство СЛАУ – пятиточечные аппроксимации линейных диффузионно-конвективных уравнений на равномерной сетке в прямоугольной области [3, 4]. Именно такая, несколько идеализированная, ситуация позволяет наглядно описать возникающие вычислительно-информационные вопросы и способы их разрешения.

---

*Ключевые слова:* декомпозиция областей, параллельные двухуровневые методы, подпространства Крылова, предобуславливающие матрицы, алгоритмы агрегации, пересечения подобластей, интерфейсные условия.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда N 14-11-00485.

При параллельном решении очень больших разреженных СЛАУ с порядками около  $10^9$  одним из основных вычислительных инструментов является двухуровневый итерационный процесс в подпространствах Крылова, использующий в качестве предобуславливания блочный метод Якоби, представляющий собой аддитивный метод Шварца.

В §2 мы даем постановку исходных задач и описание применяемых численных методов их решения. §3 посвящен изложению некоторых алгоритмов и технологий реализации для “расширенных” подобластей, на основе которых реализуется распараллеливание декомпозиции области, а в последнем параграфе обсуждаются результаты численных экспериментов при различных исходных данных и параметрах алгоритмов.

## §2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОПИСАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ

Пусть в расчетной области  $\Omega = (a_x, b_x) \times (a_y, b_y)$  требуется решить задачу Дирихле для диффузионно-конвективного уравнения

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + p \frac{\partial u}{\partial x} + q \frac{\partial u}{\partial y} &= f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \\ u|_{\Gamma} &= g(x, y), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\Gamma$  есть граница  $\Omega$ , а конвективные коэффициенты  $p, q$  считаем для простоты заданными числами.

Аппроксимацию данной краевой задачи будем проводить на равномерной сетке

$$\begin{aligned} x_i &= a_x + ih_x, \quad y_j = a_y + jh_y, \\ i &= 0, 1, \dots, N_x + 1; \quad j = 0, 1, \dots, N_y + 1; \\ h_x &= (b_x - a_x)/(N_x + 1), \quad h_y = (b_y - a_y)/(N_y + 1), \end{aligned} \quad (2)$$

с помощью какой-либо пятиточечной схемы вида

$$\begin{aligned} (Au)_l &= a_{l,l}u_l + a_{l,l-1}u_{l-1} + a_{l,l+1}u_{l+1} \\ &+ a_{l,l-N_x}u_{l-N_x} + a_{l,l+N_x}u_{l+N_x} = f_l, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $l$  есть “глобальный”, или сквозной, номер внутреннего узла сетки:

$$l = l(i, j) \equiv i + (j - 1)N_x = 1, \dots, N = N_x N_y. \quad (4)$$

Конкретный вид коэффициентов системы может быть различным, а характерные варианты формул можно найти в [3, 4]. Уравнения (3) записываются для внутренних узлов сетки, причем для околограничных

узлов, номера которых принадлежат множеству индексов  $i = 1, N_x$  или  $j = 1, N_y$ , известные из краевых условий граничные значения решения подставлены в соответствующие уравнения и перенесены в их правые части, т.е. в (3) соответствующие коэффициенты  $a_{i,l'}$  равны нулю. В векторно-матричном виде СЛАУ (3) записывается как

$$Au = f, \quad A = \{a_{i,l'}\} \in \mathcal{R}^{N,N}, \quad u = \{u_i\}, \quad f = \{f_i\} \in \mathcal{R}^N. \quad (5)$$

Далее через  $\Omega$  мы будем обозначать по контексту не только расчетную область, но и совокупность сеточных узлов  $(x_i, y_j) \in \Omega$  (будем употреблять термин “сеточная расчетная область”), а также совокупность индексов  $l = 1, \dots, N$  векторов  $u, f$  размерности  $N$ .

Проведем теперь декомпозицию области  $\Omega$ , т.е. представим ее сначала в виде объединения непересекающихся одинаковых (для простоты) подобластей – прямоугольников

$$\Omega = \bigcup_{s=1}^P \Omega_s, \quad P = P_x P_y,$$

каждый из которых содержит равное число узлов сетки

$$M = m_x m_y, \quad N_x = P_x m_x, \quad N_y = P_y m_y, \quad N = PM.$$

Можно считать, что подобласти образуют двумерную макросетку, в которой каждую макровершину можно пронумеровать парой индексов  $p, q$  (по аналогии с мультииндексами  $i, j$  для узлов сетки), а “сквозной” номер подобласти определяется как

$$\begin{aligned} s = s(p, q) &\equiv p + (q - 1)P_x = 1, \dots, P, \\ p &= 1, \dots, P_x; \quad q = 1, \dots, P_y. \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, подобласть с номером  $s(p, q)$  содержит узлы сетки со следующими индексами:

$$\begin{aligned} i &= I_{p-1} + 1 \equiv (p - 1)m_x + 1, \dots, pm_x \equiv I_p, \\ j &= J_{q-1} + 1 \equiv (q - 1)m_y + 1, \dots, qm_y \equiv J_q, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $I_p$  и  $J_q$  – начальные номера узлов сетки по  $x$  и  $y$  в  $(p, q)$ -й подобласти, а глобальные номера узлов  $l(i, j)$  вычисляются с помощью формулы (4). Каждая подобласть  $\Omega_s$  имеет свои четыре грани, которые в совокупности образуют границу, не проходящую через узлы сетки.

Перейдем теперь от сквозной нумерации узлов к их упорядоченности по подобластям — сначала пронумеруем все узлы в  $\Omega_1$ , затем — в

$\Omega_2$  и т.д. Соответствующим образом переупорядочиваем и компоненты векторов  $u, f$ , в результате чего исходная СЛАУ (3) принимает следующую блочно-матричную форму:

$$A_{s,s}\bar{u}_s + \sum_{s' \in Q_s} A_{s,s'}\bar{u}_{s'} = f_s, \quad s = 1, \dots, P. \quad (8)$$

Здесь  $\bar{u}_s \in \mathcal{R}^{N_s}$  означает подвектор вектора  $u$ , компоненты которого соответствуют узлам из  $\Omega_s$ , а  $Q_s$  означает совокупность номеров соседних к ней подобластей. В дальнейшем будем считать, что локальная упорядоченность узлов в каждой подобласти производится естественным образом: вводятся локальные пары индексов  $i' = 1, \dots, m_x$ ;  $j' = 1, \dots, m_y$ , а сквозной номер определяется с помощью аналогичной (4) формуле  $l' = i' + (j' - 1)m_x$ . Если номер подобласти равен  $s(p, q)$ , то перенумерация узлов из локальной в глобальную делается с помощью введенных в (6) величин согласно соотношениям  $i = i' + I_{p-1}$ ,  $j = j' + J_{q-1}$ .

Отметим, что приведенная выше формалистика относится к декомпозиции сеточной области без пересечения подобластей и без применения узлов-разделителей, общих для соседних подобластей. Однако для повышения общности и эффективности рассматриваемых далее алгоритмов необходимо перейти к построению “расширенных” подобластей с пересечениями.

Пусть  $\omega_l$  обозначает сеточный шаблон, или совокупность соседних узлов для  $l$ -го узла, т.е. набор номеров компонент искомого сеточного решения, участвующих в соответствующем  $l$ -м уравнении вида (3). Для сеточной подобласти  $\Omega_s$  через  $\Gamma_s = \Gamma_s^0$  обозначим ее границу, т.е. совокупность узлов, внешних по отношению к  $\Omega_s$ , но у которых хотя бы один из соседних узлов лежит в  $\Omega_s$  ( $\bar{\Omega}_s = \bar{\Omega}_s^0 = \Omega_s \cup \Gamma_s^0$  есть замыкание сеточной подобласти  $\Omega_s$ ). Пусть далее  $\Gamma_s^1$  обозначает первую расширенную границу, или первый внешний фронт  $\bar{\Omega}_s$ , т.е. множество узлов, не лежащих в  $\Omega_s$ , но имеющих хотя бы один соседний узел из  $\Omega_s$  ( $\bar{\Omega}_s^1$  есть первое расширение  $\bar{\Omega}_s^0$ ). Аналогично определим последующие стадии расширения сеточной подобласти, а количество таких стадий  $\Delta$  будем называть параметром расширенной подобласти  $\bar{\Omega}_s^\Delta = \Omega_s^\Delta \cup \Gamma_s^\Delta$ , где узлы из  $\Gamma_s^\Delta$  уже не принадлежат  $\Omega_s^\Delta$ , число узлов которой обозначаем через  $\bar{N}_s$ . Иллюстрация расширенной подобласти с параметром  $\Delta = 3$  приведена на рис. 1.

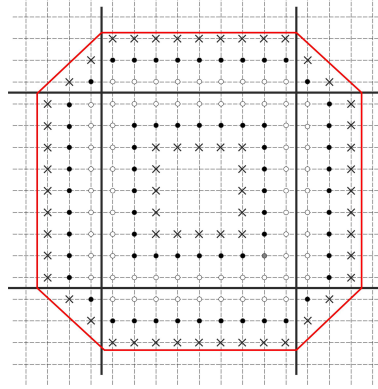


Рис. 1. Пример расширения сеточной подобласти

При построении итерационного процесса Шварца по сеточным под областям можно различным образом учитывать интерфейсные связи между соседними подобластями. Пусть  $l$ -й узел является околограничным для подобласти  $\Omega_s^\Delta$ , т.е.  $l \in \Gamma_s^{\Delta-1}$ . Соответствующее уравнение алгебраической системы запишем в виде

$$\left( a_{l,l} + \theta_l \sum_{l' \neq \Omega_s^\Delta} a_{l,l'} \right) u_l^n + \sum_{l \in \Omega_s^\Delta} a_{l,l'} u_l^n = f_l + \sum_{l' \notin \Omega_s^\Delta} a_{l,l'} (\theta_l u_l^{n-1} - u_l^{n-1}). \quad (9)$$

Здесь  $n$  означает номер итерации, а к правой и левой частям соотношения (9) добавлены члены с одинаковыми коэффициентами, содержащие множитель  $\theta_l$ , являющийся параметром итерационного процесса, см. иллюстрацию на рис. 2. Отметим, что случай  $\theta_l = 0$  можно интерпретировать как использование граничного условия Дирихле при решении вспомогательной подзадачи в  $\Omega_s$ . Аналогично случай  $\theta_l = 1$  сопоставляется использованию условию Неймана, а значение  $\theta_l \in (0, 1)$  – граничному условию 3-го рода, или Робена.

В матричной форме данный алгоритм можно представить как блочный метод Якоби

$$\bar{B}_s (\tilde{u}_s^{n+1} - \tilde{u}_s^n) = \tilde{f}_s^n - (\bar{A} \tilde{u}^n)_s \equiv \tilde{r}_s^n. \quad (10)$$

Здесь подвекторы  $\tilde{u}_s^n$  и  $\tilde{f}_s^n$  относятся к расширенным подобластям и имеют размерности  $\bar{N}_s$ , а  $\bar{B}_s \in \mathcal{R}^{\bar{N}_s, \bar{N}_s}$  – предобуславливающие матрицы, диагональные элементы которых зависят от параметров  $\theta_l$ .

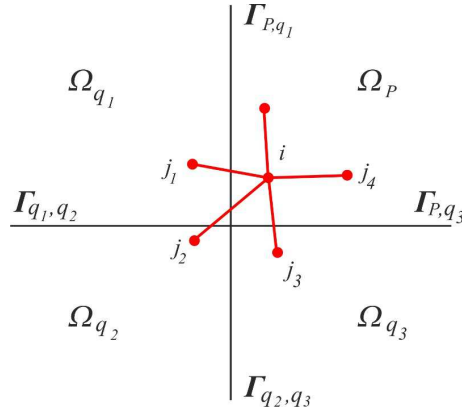


Рис. 2. Иллюстрация сеточного шаблона для околограничного узла

Итерационный процесс в форме (10) является недоопределенным, поскольку величины  $\tilde{u}_s^{n+1}$  имеют неоднозначно определенные значения в пересечениях подобластей. Мы будем использовать “ограничительный” аддитивный метод Шварца (RAS – restricted additive Schwarz), в котором очередное итерационное приближение однозначно определяется как  $u^{n+1} = \bigcup_s u_s^{n+1}$ , где  $u_s^{n+1} \in \Omega_s$  – совокупность значений подвектора  $\tilde{u}_s^{n+1}$ , определенного в расширенной подобласти  $\bar{\Omega}_s$ , но соответствующие узлы которого принадлежат  $\Omega_s$  (для  $s$ -й подобласти можно определить оператор сужения  $R_s : \bar{\Omega}_s \rightarrow \Omega_s$ ). Метод RAS можно записать в виде

$$u^{n+1} = u^n + B_{ras}^{-1} r^n, \quad (11)$$

$$B_{ras}^{-1} = R\hat{A}^{-1}W^T, \quad \hat{A} = W^T A W = \text{block-diag} \{A_s \in \mathcal{R}^{\bar{N}_s, \bar{N}_s}\},$$

а  $W = [w_1 \dots w_P] \in \mathcal{R}^{N, P}$  есть прямоугольная матрица, каждый столбец  $w_s$  которой имеет единичные компоненты в узлах из  $\bar{\Omega}_s$  и нулевые – в остальных. Отметим, что даже при симметричности исходной СЛАУ преобуславливающая матрица  $B_{ras}$  из (11) в общем случае симметричной не является. Заметим, что обращение блоков  $A_s$  матрицы  $\hat{A}$  сводится фактически к решению независимых подсистем в соответствующих подобластях, что и является основой распараллеливания аддитивного метода Шварца, или блочного алгоритма Якоби.

Скорость сходимости данного итерационного процесса зависит от количества подобластей, а точнее говоря – от диаметра графа, представляющего образуемую декомпозицией макросеть. Это можно наглядно объяснить тем, что за одну итерацию возмущение решения в одной подобласти передается только соседним, или смежным, под-областям. Для ускорения итерационного процесса естественно использовать на каждом шаге не только ближние, но и дальние связи подобластей. С этой целью в алгоритмах декомпозиции используются различные подходы: методы дефляции, грубосеточной коррекции, агрегации и т. д., – которые в той или иной степени перекликаются с многосеточными принципами, а также с малоранговыми аппроксимациями матриц, см. обширную цитируемую литературу на специальном сайте [10].

Мы в данном случае рассмотрим основанный на интерполяционном принципе следующий подход. Пусть  $\Omega_c$  – некоторая грубая сетка с числом узлов  $N_c \ll N$  в расчетной области  $\Omega$ , причем узлы исходной и грубой сеток могут и не совпадать.

Обозначим через  $\varphi_1, \dots, \varphi_{N_c}$  совокупность базисных интерполяционных многочленов некоторого порядка  $M$  на сетке  $\Omega_c$ , которые без ограничения общности будем предполагать финитными и образующими разложение единицы, т.е.

$$\sum_{k=1}^{N_c} \varphi_k(x, y) = 1.$$

Тогда вектор искомого решения СЛАУ (5) можно представить в виде разложения по данному базису:

$$u = \left\{ u_{i,j} \approx u_{i,j}^c = \sum_{k=1}^{N_c} c_k \varphi_k(x_i, y_j) \right\} = \Phi \hat{u} + \psi, \quad (12)$$

где  $\hat{u} = \{c_k\} \in \mathcal{R}^{N_c}$  есть вектор коэффициентов разложения по базисным функциям,  $\psi$  – погрешность аппроксимации, а  $\Phi = [\varphi_1 \dots \varphi_{N_c}] \in \mathcal{R}^{N, N_c}$  есть прямоугольная матрица, каждый  $k$ -й столбец которой состоит из значений базисной функции  $\varphi_k(x_i, y_j)$  в узлах исходной сетки  $\Omega$  (в силу финитности базиса большинство элементов  $\Phi$  нулевые). Столбцы, или функции  $\varphi_k$ , можно считать ортонормированными, но это не обязательно. Если в  $k$ -м узле  $P_k$  грубой сетки  $\Omega_c$  отлична от нуля только одна базисная функция ( $\varphi_k(P_{k'}) = \delta_{k,k'}$ ), то  $\hat{u}_k = c_k$  есть

точное значение искомого решения в точке  $P_k$ . После подстановки (12) в исходную СЛАУ получаем систему

$$A\Phi\hat{u} = f - A\psi, \quad (13)$$

после умножения которой на  $\Phi^T$  получаем

$$\hat{A}\hat{u} \equiv \Phi^T A\Phi\hat{u} = \Phi^T f - \Phi^T A\psi \equiv \hat{f} \in \mathcal{R}^{N_c}. \quad (14)$$

Предполагая далее погрешность  $\psi$  в (12) достаточно малой, после ее отбрасывания получаем систему для приближенного “грубосеточного” решения  $\check{u}$ :

$$\hat{A}\check{u} = \Phi^T f \equiv \check{f}. \quad (15)$$

Если матрица  $A$  невырождена, а  $\Phi$  имеет полный ранг (намного меньший  $N$ ), что мы и предполагаем в дальнейшем, то из (14) имеем

$$u \approx \tilde{u} = \Phi\check{u} = \Phi\hat{A}^{-1}\hat{f} = B_c^{-1}f, \quad B_c^{-1} = \Phi(\Phi^T A\Phi)^{-1}\Phi^T,$$

причем для погрешности полученного приближенного решения имеем

$$u - \tilde{u} = (A^{-1} - B_c^{-1})f. \quad (16)$$

Ошибку приближенного решения можно выразить и через погрешность аппроксимации  $\psi$ . Вычитая почленно уравнения (14) и (15), имеем

$$\hat{A}(\hat{u} - \check{u}) = -\Phi^T A\psi.$$

Отсюда далее получаем необходимое соотношение:

$$u - \tilde{u} = \Phi\hat{u} + \psi - \Phi\check{u} = \psi - B_c^{-1}A\psi.$$

Введенная выше матрица  $B_c^{-1}$  может рассматриваться как мало-ранговое приближение к матрице  $A^{-1}$  и использоваться в качестве предобуславливателя для построения итерационного процесса. В частности, для произвольного вектора  $u^{-1}$  мы можем выбирать начальное приближение по формуле

$$u^0 = u^{-1} + B_c^{-1}r^{-1}, \quad r^{-1} = f - Au^{-1}. \quad (17)$$

При этом соответствующая начальная невязка  $r^0 = f - Au^0$  будет ортогональна “грубосеточному” подпространству

$$\Phi = \text{span} \{\varphi_1, \dots, \varphi_{N_c}\} \quad (18)$$

в смысле выполнения соотношения

$$\Phi^T r^0 = \Phi^T (r^{-1} - A\Phi\hat{A}^{-1}\Phi^T r^{-1}) = 0. \quad (19)$$



Приведенные соотношения в работе [7] положены в основу метода сопряженных градиентов с дефляцией. При этом начальный направляющий вектор выбирается по формуле

$$p^0 = (I - B_c^{-1}A)r^0, \quad (20)$$

что обеспечивает выполнение условия ортогональности

$$\Phi^T A p^0 = 0. \quad (21)$$

Дальнейшие итерации реализуются с помощью соотношений

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n A p^n, \\ p^{n+1} &= r^{n+1} + \beta_n p^n - B_c^{-1} A r^{n+1}, \\ \alpha_n &= (r^n, r^n) / (p^n, A p^n), \quad \beta_n = (r^{n+1}, r^{n+1}) / (r^n, r^n). \end{aligned} \quad (22)$$

В данном методе, который будем обозначать DCG, на всех шагах выполняются равенства

$$\Phi^T r^{n+1} = 0, \quad \Phi^T A p^{n+1} = 0. \quad (23)$$

Если теперь вернуться к аддитивному методу Шварца (11), то с помощью использования “грубосеточного” предобуславливателя  $B_c^{-1}$  (в дополнение к предобуславливателю  $B_{ras}^{-1}$ ) его можно попытаться ускорить. Мы рассмотрим этот вопрос в более общей постановке, предполагая, что матрица  $A$  несимметрична, а предобуславливающих матриц имеется не две, а несколько. Более того, эти предобуславливатели могут меняться от итерации к итерации, что соответствует так называемому динамическому, или гибкому (flexible), предобуславливанию.

Для решения СЛАУ с несимметричной матрицей  $A$  построим семейство мульти-предобусловленных полусопряженных невязок, которые основываются на объединении двух идей, рассмотренных в работах [5, 6].

Пусть  $r^0 = f - Au^0$  есть начальная невязка алгебраической системы, а  $B_0^{(1)}, \dots, B_0^{(m)}$  – набор некоторых невырожденных легко обратимых матриц-предобуславливателей. С их помощью определим прямоугольную матрицу, составленную из начальных направляющих векторов  $p_k^0$ ,  $k = 1, \dots, m$ :

$$P_0 = [p_1^0 \dots p_m^0] \in \mathcal{R}^{N,m}, \quad p_l^0 = (B_0^{(l)})^{-1} r^0, \quad (24)$$

которые предполагаем линейно независимыми.

Отметим, что рассматриваемые алгоритмы легко обобщить на блочные итерационные методы в подпространствах Крылова, когда

берется не одно, а  $m$  различных начальных приближений  $u_l^0$ . Тогда начальные направляющие векторы в (24) можно определить как

$$p_l^0 = (B_0^{(l)})^{-1} r_l^0, \quad r_l^0 = f - Au_l^0, \quad l = 1, \dots, m,$$

однако на этих вопросах далее мы останавливаться не будем.

Последовательные приближения  $u^n$  и соответствующие невязки  $r^n = f - Au^n$  будем искать с помощью рекурсий

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + P_n \bar{\alpha}_n = u^0 + P_0 \bar{\alpha}_0 + \dots + P_n \bar{\alpha}_n, \\ r^{n+1} &= r^n - AP_n \bar{\alpha}_n = r^0 - AP_0 \bar{\alpha}_0 - \dots - AP_n \bar{\alpha}_n. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь  $\bar{\alpha}_n = (\alpha_n^1, \dots, \alpha_n^m)^T$  суть  $m$ -мерные векторы, а направляющие векторы  $p_l^n$ , составляющие столбцы прямоугольных матриц  $P_n = [P_1^n \dots P_m^n] \in \mathcal{R}^{N,m}$ , будем определять ортогональными в смысле удовлетворения соотношениям

$$P_n^T A^T AP_k = D_{n,k} = 0 \quad \text{при } k \neq n, \quad (26)$$

где  $D_{n,n}$  – симметричная положительно определенная матрица, если матрицы  $P_k$  имеют полный ранг, что мы и будем предполагать.

Очевидно, что при условиях (26) невязки удовлетворяют равенствам

$$(r^{n+1}, r^{n+1}) = (r^0, r^0) - \sum_{k=0}^n [2(r^0, AP_k \bar{\alpha}_k) - (AP_k \bar{\alpha}_k, AP_k \bar{\alpha}_k)]. \quad (27)$$

Отсюда следует, что по условию минимума функционала

$$\partial(r^{n+1}, r^{n+1}) / \partial \alpha_k^{(l)} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n; \quad l = 1, \dots, m,$$

для “векторных коэффициентов”  $\bar{\alpha}_n$  справедлива формула

$$\bar{\alpha}_n = (D_{n,n}^{-1})^{-1} P_n^T A^T r^0. \quad (28)$$

При этих значениях  $\bar{\alpha}_n$ , как легко проверить, векторы  $p_k^n, r_k^n$  удовлетворяют условиям полусопряженности, т.е.

$$P_k^T A^T r^{n+1} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (29)$$

В данном случае для функционалов невязок выполняются соотношения

$$\begin{aligned} (r^{n+1}, r^{n+1}) &= (r^n, r^n) - (C_n r^0, r^0) \\ &= (r^0, r^0) - (C_0 r^0, r^0) - \dots - (C_n r^0, r^0), \\ C_n &= P_n A D_{n,n}^{-1} A^T P_n^T. \end{aligned} \quad (30)$$

Матрицы, составленные из направляющих векторов, будем искать из рекуррентных соотношений

$$P_{n+1} = Q_{n+1} + \sum_{k=0}^n P_k \bar{\beta}_{k,n}, \quad (31)$$

где введены вспомогательные матрицы

$$Q_{n+1} = [q_1^{n+1} \dots q_m^{n+1}], \quad q_i^{n+1} = (B_{n+1}^{(l)})^{-1} r^{n+1}, \quad (32)$$

$B_{n+1}^{(l)}$  – предобуславливающие матрицы, а  $\bar{\beta}_{k,n}$  суть векторы коэффициентов, которые из подстановки (31) в условиях ортогональности (26) определяются формулой

$$\bar{\beta}_{k,n} = -D_{k,k}^{-1} P_k^T A^T A Q_{n+1}. \quad (33)$$

С помощью соотношений (31), (25) рассмотрим выражения

$$Q_k^T A^T r^n = \left( P_k^T A^T - \sum_{j=0}^{k-1} \bar{\beta}_{j,k}^T P_j^T A^T \right) \left( r^0 - \sum_{i=0}^n A P_i \bar{\alpha}_i \right), \quad (34)$$

из которых при  $k = n$  следует равенство

$$Q_n^T A^T r^n = P_n^T A^T r^0,$$

позволяющее получить вместо (28) новую формулу

$$\bar{\alpha}_n = D_{n,n}^{-1} Q_n^T A^T r^n.$$

А при  $k < n$  из (34) получаем свойство полусопряженности векторов невязок:

$$Q_k^T A^T r^n = 0, \quad k < n, \quad (35)$$

которым и определяется название данного метода.

### §3. ОСОБЕННОСТИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ РЕАЛИЗАЦИИ

Одной из целей данной работы является верификация, тестирование и сравнительный анализ эффективности различных алгоритмов решения больших разреженных СЛАУ с целью их оптимизации и включения в состав библиотеки параллельных алгебраических решателей KRYLOV [11]. При этом главные требования к разрабатываемому программному коду заключаются в высокой производительности и масштабируемом быстродействии, а также в отсутствии формальных

ограничений на порядки решаемых СЛАУ и на количество используемых процессоров или вычислительных ядер. Отметим, что в соответствии с [8] можно различать сильную и слабую масштабируемость. Первое понятие характеризует уменьшение времени выполнения одной большой задачи с увеличением числа вычислительных устройств, а второе – примерное сохранение времени решения при одновременном росте размерности (числа степеней свободы) задачи и количества вычислителей.

Реализация алгоритмов осуществлялась с учетом типовой архитектуры кластера ССКЦ СО РАН [12], на котором функционирует библиотека KRYLOV, однако без использования графических ускорителей общего назначения GPGPU, поскольку их эффективное применение в рассматриваемых методах декомпозиции областей имеет свои технологические вычислительные сложности и требует специального изучения.

Организация вычислений производится следующим естественным образом: если расчетная область разбивается на  $P$  подобластей, то решение СЛАУ осуществляется на  $P+1$  процессоре CPU (один – “корневой”, а каждый из остальных соответствует “своей” подобласти), и при этом формируется такое же количество MPI-процессов. Решение вспомогательных алгебраических систем в подобластях осуществляется одновременно на многоядерных CPU с применением многопоточных вычислений средствами OpenMP.

Поскольку алгоритмы библиотеки KRYLOV ориентированы на решение больших разреженных СЛАУ, возникающих из аппроксимации многомерных краевых задач на неструктурированных сетках, то для хранения ненулевых элементов матриц используется общераспространенный разреженный строчный формат CSR (Compressed Sparse Row). При этом на предварительном этапе формируется “глобальная” матрица  $A$  на корневом процессоре, а затем организуется распределенное хранение блочных строк  $A_s$  из (10) для  $s$ -х расширенных подобластей в памяти соответствующих процессоров.

Отметим, что в рассматриваемых двумерных сеточных краевых задачах рассматривается двумерная же декомпозиция сбалансированных подобластей, когда для примерно равного числа узлов  $N_S \approx N/P$  в каждой из них диаметр  $d$  макросетки из подобластей приблизительно равен  $\sqrt{P}$ . Так как количество итераций аддитивного метода Шварца, даже с использованием методов Крылова, пропорционально

величине  $d^\gamma$ ,  $\gamma > 0$ , то это даёт значительное преимущество перед одномерной декомпозицией, для которой  $d \approx P$ .

Масштабируемое распараллеливание алгоритмов обеспечивается синхронизацией вычислений по подобластям программными средствами системы MPI (Message Passing Interface) и минимизацией временных потерь на межпроцессорные обмены. Решение автономных СЛАУ в  $\Omega_s$  осуществляется прямыми или итерационными методами, что требует на каждом шаге двухуровневого процесса применения  $(N/P)^{\gamma_1}$ ,  $\gamma_1 > 0$ , объёма вычислений. А поскольку при этом необходим обмен данными, соответствующими только периферийным узлам смежных подобластей, то объём такой информации гораздо меньше и пропорционален  $(N/P)^{\gamma_1/2}$ , что позволяет в принципе совмещать во времени арифметические действия и коммуникационные операции.

Высокая производительность реализованных вычислительных методов и технологий поддерживается активным использованием стандартных функций и векторно-матричных операций из систем BLAS и SPARSE BLAS, включенных в состав библиотеки MKL INTEL [9].

#### §4. ПРИМЕРЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Мы приведем результаты методических расчетов по решению пятиточечных СЛАУ для решения задачи Дирихле в квадрате на квадратных сетках с числом узлов  $128^2$  и  $256^2$ . Вычисления проводились на  $P = 2^2, 4^2, 8^2$  процессорах, каждый из которых соответствовал одной из подобластей, образующих квадратную макросетку. Итерации по подобластям осуществлялись с помощью алгоритма BiCGStab [13] при использовании критерия останова

$$\|r^n\|_2 \leq 10^{-8} \|f\|_2.$$

Решение вспомогательных подсистем в подобластях осуществлялось с помощью прямого алгоритма, реализуемого в многопоточковом режиме программой PARDISO из библиотеки Intel MKL [9]. При этом наиболее трудоемкая часть LU-разложения матрицы выполняется только один раз перед началом итераций.

В каждой клетке табл. 1 приведены количества итераций по подобластям и времена решения СЛАУ на сетках  $128^2$  и  $256^2$  (две верхние и две нижние пары чисел соответственно), при этом 1-я и 3-я строки соответствуют нулевой конвенции, а 2-я и 4-я строки – значениям

конвективных коэффициентов  $p = q = 4$ ) в зависимости от различных значений параметра перехлеста  $\Delta$ .

$P \setminus \Delta$	0	1	2	3	4	5
4	18 1.75	11 1.45	9 1.37	7 1.26	7 1.26	6 1.20
	31 2.45	17 1.77	13 1.66	12 1.53	11 1.50	10 1.35
	27 6.85	16 4.37	12 3.51	10 3.02	9 2.82	8 2.49
	46 11.37	25 6.53	19 5.16	17 4.74	15 4.28	13 3.76
16	32 1.42	18 1.18	14 1.19	12 1.09	11 0.89	9 0.79
	41 2.23	25 2.6	19 2.44	16 1.90	14 1.28	14 1.78
	41 3.85	24 2.83	20 2.20	17 1.80	14 1.38	14 1.66
	58 5.96	35 3.55	28 3.03	22 2.58	19 1.99	18 1.99
64	43 1.56	26 1.66	19 1.39	16 1.50	14 1.56	12 0.86
	57 2.02	34 1.91	26 1.78	21 1.98	20 1.69	18 1.35
	60 4.75	36 4.16	27 3.35	22 3.11	20 3.00	18 4.66
	87 7.04	47 5.61	38 4.89	31 4.13	28 4.02	25 4.48

Таблица 1. Число итераций и время решения задачи (сек.) на сетках  $128^2$  и  $256^2$ .

Как видно из результатов, с увеличением  $\Delta$  до 5 число итераций сокращается в 3 – 4 раза, однако при больших параметрах перехлеста подобластей время решения СЛАУ начинает расти, так что практически для всех сеток и количеств процессоров оптимальное значение  $\Delta$  оказывается равным около 3 – 4. Наличие ненулевых конвективных коэффициентов  $p, q$  увеличивает число итераций примерно на 30–50%.

В приводимых далее таблицах ради краткости приводятся результаты решения только уравнения Пуассона, т.е. при отсутствии конвективных членов в уравнении (1). Как показывают расчеты, при умеренных значениях  $p, q$  ( $|p| + |q| < 50$ ) характер итерационных процессов меняется слабо.

В табл. 2 мы приводим количества итераций при различных  $\theta$  из уравнения (9), определяющих интерфейсные граничные условия для смежных подобластей (в каждой клетке левое и правое числа соответствуют сеткам  $128^2$  и  $256^2$ ).

Как видно из этих результатов, в приведенных расчетах для всех сеток и разного количества подобластей, обнаруживается оптимальное значение  $\theta$ , близкое к единице, однако выигрыш оказывается только в пределах 10-40%. Данные вычисления проводились без пересечения

$P \setminus \theta$	0	0.5	0.6	0.7	0.9975
4	18 27	16 26	16 24	14 23	10 12
16	32 41	28 40	27 39	27 40	31 75
64	43 60	42 56	40 55	41 55	93 86

Таблица 2. Количество итераций на сетках  $128^2$  и  $256^2$  при различных параметрах  $\theta$ .

подобластей, а при  $\Delta \geq 1$  наилучшая величина  $\theta$  оказывается нулевой, что соответствует условиям Дирихле на смежных границах.

В приведенных выше примерах характер итераций меняется слабо при изменении начальной ошибки. Описанные в табл. 1, 2 эксперименты проводились при  $u^0 = 0$  и при точном решении СЛАУ  $u = 1$ .

$N \setminus N_c$	0	$2^2$	$4^2$	$8^2$
$64^2$	176	167	166	103
		118	87	56
$128^2$	338	309	255	181
		220	159	104
$256^2$	609	544	442	276
		376	294	190

Таблица 3. Влияние дефляции в методе сопряженных градиентов.

В табл. 3 демонстрируется эффект применения двух вариантов методов дефляции при использовании метода сопряжённых градиентов без какого-либо дополнительного предобуславливания, в том числе без аддитивного метода Шварца для трёх квадратных сеток с разным числом узлов  $N$ . Базисные функции  $\phi_k(x, y)$  являлись билинейными финитными. В трёх правых колонках верхние числа в каждой клетке соответствуют однократной ортогонализации вида (17), (21), а нижние – ортогонализации на каждой итерации по формулам (22), (23). Сравнение с алгоритмами без дефляции (колонка с  $N_c = 0$ ) показывает ускорение итераций с ростом  $P$  до трёх раз. Однако следует иметь

виду, что реализация многократной ортогонализации “удорожает” каждую итерацию, так что оптимизация алгоритмов в практическом плане требует дополнительных исследований.

$N \setminus P$	$2^2$	$4^2$	$8^2$
$64^2$	19	26	37
	23	21	28
$128^2$	29	35	51
	24	26	36
$256^2$	38	53	71
	31	35	40

Таблица 4. Влияние агрегации в методе AS (декомпозиция без пересечения подобластей).

Результаты из табл. 4 иллюстрируют аналогичные данные, но при использовании аддитивного метода Шварца с декомпозицией области на  $P$  подобластей. Узлы редкой сетки  $\Omega_c$  берутся в окрестности углов подобластей, т.е. при  $P = 2^2, 4^2, 8^2$  количества узлов грубой сетки, т.е. значения  $N_c$ , равнялись  $3^2, 5^2$  и  $9^2$  соответственно. Базисные функции  $\phi_k(x, y)$ , как и в предыдущей серии экспериментов из табл. 3, являлись билинейными финитными. В каждой клетке табл. 4 верхнее число соответствует расчётам без дефляции, а нижнее означает количество итераций при однократной ортогонализации начального приближения.

Приведённые результаты для рассмотренных сеток и макросеток имеют примерно тот же характер, что и в таблице 3: увеличение размерности пространства дефляции даёт уменьшение итераций по подобластям, но при этом объём вычислений на каждом шаге растёт. В данном случае внешние итерации осуществлялись по методу CG, применимость которого при этом объясняется тем, что декомпозиция области проводилась без пересечения подобластей.

Отметим, что описанные в табл. 3, 4 эксперименты проводились при начальном приближении  $u^0 = 0$  и точном решении СЛАУ  $u(x_i, y_j) =$



$x_i^2 - y_j^2$ . Естественно, что эффективность рассмотренной “интерполяционной” дефляции зависит от характера искомого решения. Например, если оно имеет вид  $u(x_i, y_j) = x - y$ , то использование билинейных базисных функций  $\varphi_k(x, y)$  при  $N_c \geq 4$  дает сходимость за одну итерацию.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. П. Ильин, *Параллельные методы и технологии декомпозиции областей*. — Вестник ЮУрГУ **46** (305) 2012, 31–44.
2. A. Toselli, O. Widlung, *Domain Decomposition Methods – Algorithms and Theory*. Springer Ser. Comput. Math., v. 34, 2005.
3. M. Yu. Andreeva, V. P. Il'in, *Itskovich E.A. Two solvers for nonsymmetric SLAE*. — Bull. NCC, ser. Num. Anal. **12** (2003), 1–16.
4. В. П. Ильин, *Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений*. — Новосибирск, изд. ИВМиМГ СО РАН, 2001, 318 с.
5. R. Bridson, C. Greif, *A multipreconditioned conjugate gradient algorithm*. — SIAM J. Matrix Anal. Appl. **27**, No. 4 (2006), 1056–1068.
6. В. П. Ильин, Е. А. Ицкович, *О методах полусопряженных направлений с динамическим предобуславливанием*. — Сиб. ж. индустр. матем, **10**, No. 4 (2007), 41–54.
7. A. Chapman, Y. Saad, *Deflated and augmented Krylov subspace technique*. — Numer. Linear Algebra Appl. **4**, No. 1 (1997), 43–66.
8. O. Dubois, M. J. Gander, A. St-Cyr, S. Loisel, D. Szyld, *The optimized Schwarz method with a coarse grid correction*. — SIAM J. Sci. Comput. **34**, No. 1 (2012), 421–458.
9. URL:<https://software.intel.com/en-us/intel-mkl>
10. URL:<http://www.ddm.org>
11. Д. С. Бутюгин, Я. Л. Гурьева, В. П. Ильин, Д. В. Первозкин, А. В. Петухов, И. Н. Скопин, *Функциональность и технологии алгебраических решателей в библиотеке Krylov*. — Вестник ЮУрГУ, т. 2, N 3, 2013, 92–105.
12. URL:<http://www2.sccc.ru>
13. Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS Publ., New York, 1996.

Gurieva Y. L., Il'in V. P. Some parallel methods and technologies of domain decomposition.

The efficiency of two-level iterative processes in Krylov subspaces is investigated, as well as their parallelization in solving large sparse nonsymmetric systems of linear algebraic equations arising from grid approximations of two-dimensional boundary value problems for diffusion-convection equations with different coefficient values. Special attention is paid to optimization of the subdomain intersection size, to the types of boundary conditions on adjacent boundaries in the domain decomposition method,

and to the aggregation (or coarse grid correction) algorithms. Outer iterative process is based on the additive Schwarz algorithm, while parallel solution of the subdomain algebraic systems is effected by a direct or a preconditioned Krylov method. A crucial point in programming realization of these approaches is a technology of forming the so-called extended algebraic subsystems in the compressed sparse row format. A comparative analysis of the influence of various parameters is carried out basing on numerical experiments data. Some issues related to the scalability of parallelization are discussed.

Институт вычислительной математики и  
математической геофизики СО РАН  
Новосибирск, Россия  
*E-mail:* yana@lapasrv.sscs.ru

Поступило 10 ноября 2014 г.

Новосибирский  
государственный университет,  
Новосибирск, Россия  
*E-mail:* ilin@sscs.ru