

О ТЕХНОЛОГИЯХ УСКОРЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ МЕТОДОВ ДЕКОМПОЗИЦИИ *

Я.Л.Гурьева, В.П.Ильин

Аннотация

Одним из главных препятствий масштабированному распараллеливанию алгебраических методов декомпозиции для решения сверхбольших разреженных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) является замедление скорости сходимости аддитивного итерационного алгоритма Шварца в подпространствах Крылова при увеличении количества подобластей. Целью данной работы является сравнительный экспериментальный анализ различных приёмов ускорения итераций: параметризованное пересечение подобластей, использование специальных интерфейсных условий на границах смежных подобластей, а также применение грубосеточной коррекции (агрегации, или редукции) исходной СЛАУ для построения дополнительного предобуславливателя. Распараллеливание алгоритмов осуществляется на двух уровнях программными средствами для распределённой и общей памяти. Тестовые СЛАУ получаются при помощи конечно-разностных аппроксимаций задачи Дирихле для диффузионно-конвективного уравнения с различными значениями конвективных коэффициентов на последовательности сгущающихся сеток.

Ключевые слова: декомпозиция областей, аддитивный метод Шварца, алгоритмы редукции, предобусловленные крыловские процессы, масштабируемое распараллеливание, распределённая и общая память, вычислительный эксперимент

1 Введение

Данная работа посвящена ключевой проблеме обеспечения масштабированного параллелизма при решении сверхбольших систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами, возникающими при решении многомерных сеточных краевых задач, которая связана с двумя ан-

*Работа поддержана грантом Российского научного фонда N 14-11-00485, экспериментальная часть поддержана грантом РФФИ N 14-07-00128. Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции "Параллельные вычислительные технологии 2015".

тагонистическими обстоятельствами. С одной стороны, ускорение вычислений на многопроцессорных вычислительных системах требует применения декомпозиции расчетной области на большое количество подобластей, для каждой из которой соответствующая подзадача решается синхронно с остальными путем формирования “своего” MPI – процесса (и применением “внутреннего” ускорения за счет многопоточковых технологий). С другой стороны, рост числа подобластей неизбежно ведет к замедлению внешнего итерационного процесса. Для устранения этого эффекта активно ведутся исследования по повышению эффективности двухуровневых итерационных методов декомпозиции, см. [1]- [5].

Наибольшие успехи в этом направлении достигаются за счет применения алгоритмов ускорения, которые в литературе называются методами редукции, грубосеточной коррекции, агрегации и дефляции, имеющими общую идеологию в том смысле, что все они используют построение предобуславливателей на основе малоранговых аппроксимаций для матриц, обратных к исходной матрице. В некоторых вариантах эти подходы перекликаются с алгебраическими многосеточными принципами. Теоретические исследования с получением оценок скорости сходимости итераций и оптимизации алгоритмов здесь удаются далеко не всегда, и поэтому большую роль имеют систематические численные эксперименты со сравнительным анализом результативности различных приемов.

Целью данной работы являются экспериментальные исследования параллельных итерационных методов декомпозиции областей (аддитивных алгоритмов Шварца, или блочных методов Якоби) при помощи построения предобуславливающих матриц на основе агрегирования СЛАУ с использованием интерполяционных финитных базисных функций лангражевого типа. В п. 2 дается описание постановки проблемы и методов ее решения, в п. 3 приводятся особенности параллельной реализации предлагаемых алгоритмов, а в п.4 анализируются результаты модельных расчетов для достаточно представительной серии задач, получаемых из конечно-разностных аппроксимаций диффузионно-конвективного уравнения с различными значениями диффузионных коэффициентов на разных сгущающихся сетках. В заключении обсуждаются некоторые нерешенные проблемы и указываются направления дальнейших исследований.

2 Двухуровневые итерационные процессы с редукцией

Рассмотрим вещественную СЛАУ вида

$$Au = f, \quad A = \{a_{l,\nu}\} \in \mathcal{R}^{N,N}, \quad u = \{u_l\}, \quad f = \{f_l\} \in \mathcal{R}^N, \quad (1)$$

с разреженной матрицей A , которую будем предполагать полученной из аппроксимации некоторой многомерной краевой задачи на сетке Ω^h . Методической конкретизацией нам будет служить двумерная задача Дирихле в ограниченной области Ω для диффузионно-конвективного уравнения

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + p \frac{\partial u}{\partial x} + q \frac{\partial u}{\partial y} = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad (2)$$

$$u|_{\Gamma} = g(x, y),$$

где Γ есть граница Ω , а коэффициенты p, q суть заданные функции координат. Иллюстрация вычислительных подходов далее проводится на СЛАУ вида (1), полученной из сеточной аппроксимации краевой задачи (2).

Будем предполагать, что компоненты u_l, f_l соответствуют l -му узлу сетки Ω^h , общее число которых (участвующих в алгебраической системе после исключения краевых условий, см. [3]) равно N .

Проведем декомпозицию сеточной расчетной области Ω^h , т.е. представим ее сначала в виде объединения P непересекающихся примерно одинаковых подобластей $\Omega^h = \bigcup_{s=1}^P \Omega_s^h$, каждая из которых содержит “в среднем” число узлов сетки $N_s \cong N/P$, $\sum_{s=1}^P N_s = N$.

Перейдем далее к нумерации узлов, соответствующей их упорядоченности по подобластям — сначала пронумеруем все узлы в Ω_1^h , затем — в Ω_2^h и т.д. Аналогичным образом переупорядочиваем и компоненты векторов u, f , в результате чего исходная СЛАУ (1) принимает следующую блочно-матричную форму:

$$A_{s,s} \bar{u}_s + \sum_{s' \in Q_s} A_{s,s'} \bar{u}_{s'} = f_s, \quad s = 1, \dots, P. \quad (3)$$

Здесь $\bar{u}_s \in \mathcal{R}^{N_s}$ означает подвектор вектора u , компоненты которого соответствуют узлам из Ω_s , а Q_s означает совокупность номеров соседних к ней подобластей.

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 $\bar{\Omega}_s^h$ с пересечениями (индексы “ h ” далее опускаем).

Пусть ω_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 СЛАУ (1). Для сеточной подобласти Ω_s через $\Gamma_s = \Gamma_s^0$ обозначим ее границу, т.е. совокупность узлов, внешних по отношению к Ω_s , но у которых хотя бы один из соседних узлов лежит в Ω_s ($\bar{\Omega}_s^0 = \Omega_s \cup \Gamma_s^0$) есть замыкание исходной сеточной подобласти Ω_s . Пусть далее Γ_s^1 обозначает первую расширенную границу, или первый внешний фронт $\bar{\Omega}_s$, т.е. множество узлов, не лежащих в $\bar{\Omega}_s$, но имеющих хотя бы один соседний узел из $\bar{\Omega}_s^0$ ($\bar{\Omega}_s^1$ есть первое расширение $\bar{\Omega}_s^0$). Аналогично определим последующие стадии расширения сеточной подобласти, а количество таких стадий Δ будем называть параметром расширенной подобласти $\bar{\Omega}_s = \bar{\Omega}_s^\Delta = \Omega_s^\Delta \cup \Gamma_s^\Delta$, где узлы из Γ_s^Δ уже не принадлежат Ω_s^Δ , число узлов которой обозначаем через $\bar{N}_s$. Иллюстрация расширенной подобласти с параметром $\Delta = 3$ приведена на рис. 1.

При построении итерационного процесса Шварца по сеточным подобластям можно различным образом учитывать интерфейсные связи между соседними подобластями. Пусть l -й узел является околограницным для подобласти Ω_s^Δ , т.е. $l \in \Gamma_s^{\Delta-1}$. Соответствующее уравнение алгебраической

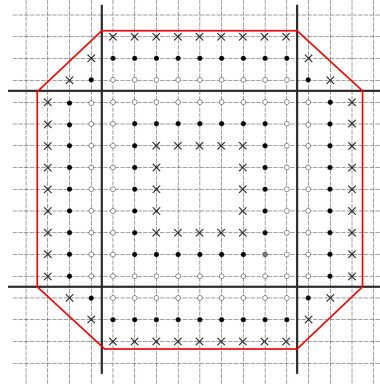


Рис. 1: Расширение сеточной подобласти для $\Delta = 3$

системы запишем в виде

$$(a_{l,l} + \theta_l \sum_{l' \neq \Omega_s^\Delta} a_{l,l'}) u_l^n + \sum_{l \in \Omega_s^\Delta} a_{l,l'} u_{l'}^n = f_l + \sum_{l' \notin \Omega_s^\Delta} a_{l,l'} (\theta_l u_l^{n-1} - u_{l'}^{n-1}). \quad (4)$$

Здесь n означает номер итерации, а к правой и левой частям соотношения (4) добавлены члены с одинаковыми коэффициентами, содержащие множитель θ_l , являющийся параметром итерационного процесса, см. рис. 2. Отметим, что случай $\theta_l = 0$ можно интерпретировать как использование граничного условия Дирихле при решении вспомогательной подзадачи в Ω_s . Аналогично случай $\theta_l = 1$ сопоставляется использованию условия Неймана, а значение $\theta_l \in (0, 1)$ – граничному условию 3-го рода, или Робена.

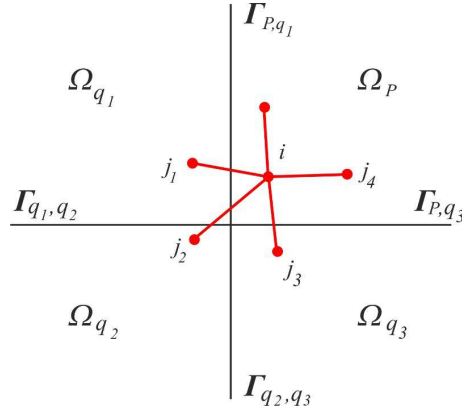


Рис. 2: Сеточный шаблон для околограничного узла

В матричной форме данный алгоритм можно представить как блочный метод Якоби

$$\bar{B}_s(\tilde{u}_s^{n+1} - \tilde{u}_s^n) = \tilde{f}_s^n - (\bar{A}\tilde{u}^n)_s \equiv \tilde{r}_s^n. \quad (5)$$

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 θ_l .

Итерационный процесс в форме (5) является недоопределенным, поскольку величины $\tilde{u}_s^{n+1}$ имеют неоднозначные значения в пересечениях под областей. 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 Ω_s (для s -й подобласти можно определить оператор сужения $R_s : \bar{\Omega}_s \rightarrow \Omega_s$). Метод RAS можно записать в виде

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + B_{ras}^{-1} r^n = u^n + p^n, \quad r^{n+1} = r^n - AB_{ras}^{-1} r^n = r^n - AP^n, \\ p^n &= B_{ras}^{-1} r^n, \\ B_{ras}^{-1} &= R\hat{A}^{-1}W^T, \quad \hat{A} = W^T A W = \text{block-diag} \{A_s \in \mathcal{R}^{\bar{N}_s, \bar{N}_s}\}, \end{aligned} \quad (6)$$

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 предобуславливающая матрица B_{ras} из (6) 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.

Данный итерационный процесс можно записать в форме

$$u^{n+1} = Tu^n + \bar{f}, \quad \bar{f} = B_{ras}^{-1} f, \quad (7)$$

где матрица перехода имеет вид

$$T = I - B_{ras}^{-1} A.$$

Очевидно, что при сходимости итераций $u^n \rightarrow u$ в пределе $n \rightarrow \infty$ мы из (7) получаем решение СЛАУ

$$\bar{A}u \equiv (I - T)u = \bar{f}, \quad (8)$$

где $\bar{A}$ есть предобусловленная матрица.

Скорость сходимости данного итерационного процесса зависит от количества подобластей, а точнее говоря – от диаметра графа, представляющего образующую декомпозицией макросеть. Это можно наглядно объяснить тем, что за одну итерацию возмущение решения в одной подобласти передается только соседним, или смежным, подобластям. Для повышения скорости сходимости итераций естественно использовать на каждом шаге не только ближние, но и дальние связи подобластей. С этой целью в алгоритмах декомпозиции используются различные ускоряющие 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 [5]. Общим в этих случаях является то, что каким-то специальным образом строится вспомогательная СЛАУ малого порядка (редуцированная система), решение которой в определенном смысле приближает исходное решение. Поэтому всем алгоритмам такого типа можно дать общее название – методы редукции.

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

Обозначим через $\varphi_1, \dots, \varphi_{N_c}$ совокупность базисных интерполяционных (лагранжевого типа) многочленов некоторого порядка M на сетке Ω_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 (1) можно представить в виде разложения по данному базису:

$$u = \{u_l \approx u_l^c = \sum_{k=1}^{N_c} c_k \varphi_k(x_l, y_l)\} = \Phi \hat{u} + \psi, \quad (9)$$

где $\hat{u} = \{c_k\} \in \mathcal{R}^{N_c}$ есть вектор коэффициентов разложения по базисным функциям, ψ – 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 Ω (в силу финитности базиса большинство элементов Φ – нулевые). Столбцы, или функции φ_k , можно считать ортонормированными, но это не обязательно. Если в k -м узле P_k грубой сетки Ω_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 (9) в исходную СЛАУ (1) получаем систему

$$A\Phi\hat{u} = f - A\psi, \quad (10)$$

после умножения которой на Φ^T получаем (индекс “ T ” означает транспонирование)

$$\hat{A}\hat{u} \equiv \Phi^T A\Phi\hat{u} = \Phi^T f - \Phi^T A\psi \equiv \hat{f} \in \mathcal{R}^{N_c}. \quad (11)$$

Предполагая далее погрешность ψ в (9) достаточно малой, после ее отбрасывания получаем систему для приближенного “грубосеточного” решения $\hat{u}$:

$$\hat{A}\hat{u} = \Phi^T f \equiv \hat{f}. \quad (12)$$

Если матрица A невырождена, а Φ имеет полный ранг (намного меньший N), что мы и предполагаем в дальнейшем, то из (12) имеем

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

причем для погрешности полученного приближенного решения имеем

$$u - \tilde{u} = (A^{-1} - B_c^{-1})f. \quad (13)$$

Ошибку приближенного решения можно выразить и через погрешность аппроксимации ψ . Вычитая почленно уравнения (11) и (12), имеем

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

Отсюда далее получаем необходимое соотношение:

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

Введенная выше матрица B_c^{-1} может рассматриваться как малоранговое 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

$$u^0 = u^{-1} + B_c^{-1} r^{-1}, \quad r^{-1} = f - Au^{-1}. \quad (14)$$

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

$$\Phi = \text{span} \{ \varphi_1, \dots, \varphi_{N_c} \}, \quad (15)$$

в смысле выполнения соотношения

$$\Phi^T r^0 \equiv \Phi^T (r^{-1} - A \Phi \hat{A}^{-1} \Phi^T r^{-1}) = 0. \quad (16)$$

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

$$p^0 = (I - B_c^{-1} A) r^0 = C r^0, \quad C = I - B_c^{-1} A, \quad (17)$$

что обеспечивает выполнение условия ортогональности

$$\Phi^T A p^0 = 0. \quad (18)$$

Поскольку рассматриваемые нами СЛАУ в общем случае несимметричны, мы будем использовать стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGStab, [11], [12]). Точнее говоря, мы его применяем к решению предобусловленной системы (8). В нижеследующих формулах следует иметь ввиду, что умножение на матрицу $\bar{A}$ фактически означает реализацию итерационного шага (7), включающего решение вспомогательных систем в подобластях:

$$\begin{aligned} r^0 &= \bar{f} - \bar{A} u^0, \quad p^0 = r^0, \quad n = 0, 1, \dots : \\ s^n &= r^n - \alpha_n \bar{A} p^n, \quad \alpha_n = (r^n, r^0) / (\bar{A} p^n, r^0), \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n + \omega_n s^n, \quad \omega_n = (\bar{A} s^n, s^n) / (\bar{A} s^n, \bar{A} s^n), \\ r^{n+1} &= s^n - \omega_n \bar{A} s^n, \\ p^{n+1} &= r^{n+1} + \beta_n (p^n - \omega_n \bar{A} p^n), \\ \beta_n &= \alpha_n (r^{n+1}, r^0) / (\omega_n (r^n, r^0)). \end{aligned} \quad (19)$$

Отметим, что реализация данного алгоритма требует двух умножений на матрицу $\bar{A}$ на каждой итерации.

3 Методы и технологии распараллеливания алгоритмов

Реализация параллельных методов декомпозиции областей в целом может быть представлена следующими этапами:

- осуществление предварительных “доитерационных” операций, включающих сбалансированную декомпозицию расчетной сеточной области; основные действия здесь выполняются на корневом процессоре, однако главным результатом является формирование вспомогательных СЛАУ для подобластей, распределенных по соответствующим MPI-процессорам;
- выполнение внешнего итерационного процесса в подпространствах Крылова с организацией обменов между процессами;
- параллельное (синхронное) решение алгебраических подсистем на многоядерных процессорах с общей памятью с использованием “внутреннего” распараллеливания многопоточковых вычислений средствами OpenMP.

Задачами экспериментальных исследований являются 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 [8]. 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 [4] 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 [9], 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 [10]. Решение вспомогательных алгебраических систем в подобластях получается одновременно на многоядерных CPU с применением многопоточковых 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 в проведенных экспериментах на предварительном этапе формируется “глобальная” матрица A на корневом процессоре, а затем организуется распределенное хранение блочных строк $\bar{A}_s$ из (5) для s -х расширенных подобластей в памяти соответствующих процессоров. Необходимо иметь в виду,

что при реализации “производственного” кода для решения сверхбольших СЛАУ требуется “распределённый” режим формирования глобальной матрицы в разных MPI процессах на соответствующих узлах вычислительной системы без ограничительной перегрузки памяти узла корневого процесса.

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^γ , $\gamma > 0$, 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 Ω_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, включённых в состав библиотеки MKL INTEL [10].

Следует отметить, что используемые в данной работе вычислительные технологии являются “полуметодическими”. С одной стороны, используется универсальный формат CSR для хранения СЛАУ, но в то же время мы ограничиваемся достаточно простыми двумерными краевыми задачами на прямоугольных сетках.

4 Примеры численных экспериментов

Приведем результаты методических расчетов по решению пятиточечных СЛАУ, полученных с помощью монотонных аппроксимаций экспоненциального типа [6], для решения задачи Дирихле (2) в квадрате на квадратных сетках с числом узлов 64^2 , 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 [11], при использовании критерия останова

$$\|r^n\|_2 \leq \epsilon \|f\|_2, \quad \epsilon = 10^{-8}.$$

Решение вспомогательных подсистем в подобластях осуществлялось с помощью прямого алгоритма, реализуемого в многопоточном режиме программой PARDISO [10]. При этом наиболее трудоемкая часть LU-разложения матрицы выполняется только один раз перед началом итераций.

В приводимых далее результатах численных экспериментов указывается только количество итераций, определяющих скорость сходимости итераций исследуемых методов. Поскольку в рассматриваемых двумерных задачах СЛАУ не являются сверхбольшими, времена расчётов здесь не являются характерными (хотя они примерно пропорциональны числу итераций).

В таблицах 1, 2 мы приводим результаты экспериментов, соответственно для значений $p = q = 0$ и $p = q = 4$ в уравнении (2), по исследованию влияния методов редукции и параметра перехлеста Δ подобластей на скорость сходимости итераций. В расчетах использовались значения $\Delta = 0, 1, 2$ и при этом дополнительно применялось ускорение внешних итераций с помощью упрощенного варианта агрегации, или грубосеточной коррекции, когда корректируются только начальное приближение u^0 и начальный корректирующий вектор p^0 по формулам (14), (17). При этом использовались интерполяционные приближения искомого решения вида (9) нулевого или первого порядка. В простейшем варианте значения базисных функций $\varphi_k(x_i, y_j)$, число которых равно $N_c = P_x \cdot P_y$, брались равными единице, если узел (x_i, y_j) принадлежит подобласти Ω_k , и нулю, если $(x_i, y_j) \notin \Omega_k$.

Во втором случае использовались $N_c = (P_x + 1)(P_y + 1)$ базисных кусочно-билинейных функций вида

$$\begin{aligned}\varphi_k(x, y) &= \hat{\psi}_I(x) \check{\psi}_J(y), \\ \hat{\psi}_I(x_{I'}) &= \delta_{I, I'}, \quad \check{\psi}_J(y_{J'}) = \delta_{J, J'}, \\ I &= 0, 1, \dots, P_x; \quad J = 0, 1, \dots, P_y \quad k = I + 1 + J(P_x + 1),\end{aligned}\tag{20}$$

определенных на квадратной макросетке из подобластей при значениях $P_x = P_y = \sqrt{P}$ ($\delta_{I, I'}$ и $\delta_{J, J'}$ суть символы Кронекера), а линии $x = X_I$ и $y = Y_J$ выбирались проходящими через вершины подобластей. При этом в формуле (7) величина $u(x_l, y_l)$ аппроксимировалась с помощью четырех “своих” базисных функций $\varphi_k(x, y)$, по условиям принадлежности ячейке макросетки

$$X_I \leq x_l \leq X_{I+1}, \quad Y_J \leq y_l \leq Y_{J+1}.$$

Соответственно в каждой строке матрицы Φ содержится только 4 ненулевых элемента, а столбцы этой матрицы отличны от нуля только в позициях, соответствующих номерам l узлов сетки, принадлежащих “своей” подобласти.

Результаты табл. 1, 2 получены при использовании коррекции нулевого начального приближения для точного решения $u = x^2 - y^2$. Значения параметров θ_l из формулы (4) везде брались равными нулю, т.е. интерфейсные граничные условия были 1-го рода. В каждой клетке этих таблиц верхняя строка относится к расчетам без агрегации, средняя – к применению агрегации при помощи кусочно-постоянной интерполяции, нижняя – к применению агрегации с кусочно-билинейными базисными функциями вида (20). Три числа в каждой строке соотносятся значениям перехлеста подобластей $\Delta = 0, 1, 2$ (левая, средняя и правая цифры в клетках таблиц 1 и 2). Данные в таблицах 1 и 2 приведены для значений конвективных членов уравнения (2), равных 0 и 4 соответственно.

Как видно из приведенных результатов, количества итераций для всех сеток естественным образом растут с увеличением числа подобластей P и убывают с ростом Δ . Применение агрегации несколько ускоряет итераци-

Таблица 1: Количество итераций BiCGStab для $\Delta = 0, 1, 2$, $p = q = 0$

$N \setminus P$	2^2	4^2	8^2
64^2	19 11 8	26 15 12	37 20 15
	20 11 8	27 15 11	31 18 13
	16 9 7	21 12 9	27 15 11
128^2	27 15 11	34 22 17	51 31 21
	29 18 13	39 21 13	48 25 21
	22 14 10	25 16 12	32 21 15
256^2	37 21 17	54 31 23	72 43 32
	41 23 19	52 29 22	59 42 28
	33 18 15	35 21 17	41 26 21

Таблица 2: Количество итераций BiCGStab для $\Delta = 0, 1, 2$, $p = q = 4$

$N \setminus P$	2^2	4^2	8^2
64^2	19 10 8	22 13 11	33 16 13
	18 11 8	23 14 10	29 16 12
	16 9 8	20 12 9	28 16 13
128^2	26 15 12	37 21 16	41 25 18
	24 15 13	31 19 15	41 24 17
	26 13 10	30 16 13	41 22 17
256^2	36 21 17	55 26 20	55 37 29
	34 20 16	45 28 21	58 35 26
	34 19 14	53 23 19	47 31 23

онный процесс, но для усиления этого эффекта требуются дополнительные исследования.

В Табл. 3 мы приводим количества итераций при различных θ из уравнения (4), определяющих интерфейсные граничные условия для смежных подобластей (в каждой клетке левое и правое числа соответствуют сеткам 128^2 и 256^2), а значения параметров брались постоянными для всех узлов, т.е. $\theta_l = \theta$. Рассматривался случай подобластей без пересечения, т.е. $\Delta = 0$, а также без применения ускоряющих методов редукции.

Таблица 3: Количество итераций на сетках 128^2 и 256^2 при различных параметрах θ

$P \setminus \theta$	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

Как видно из этих результатов, в приведенных расчетах для всех сеток и разного количества подобластей, обнаруживается оптимальное значение θ , близкое к единице, однако выигрыш оказывается только в пределах 10-40%. Данные вычисления проводились без пересечения подобластей, а при $\Delta \geq 1$ наилучшая величина θ оказывается нулевой, что соответствует условиям Дирихле на смежных границах.

5 Заключение

Результаты данной работы носят предварительный характер в том смысле, что оптимизация математической эффективности исследуемых алгебраических методов, а также производительности их программных реализаций требует дополнительных исследований. Одним из перспективных направлений является использование мультипредобуславливания [3] во внешнем итерационном процессе, что в нашем случае означает оптимизацию совместного использования блочного метода Якоби (по подобластям) и алгоритмов редукции. Также недостаточно изучен и в данной статье не освещается вопрос о динамическом регулировании критерия останова итерационных процессов при их использовании для решения вспомогательных задач в подобластях. Кроме того, серьёзной технологической проблемой остаётся эффективное применение быстродействующих графических ускорителей общего назначения на типовых архитектурах существующих вычислительных систем.

Список литературы

- [1] Ильин В.П. Параллельные методы и технологии декомпозиции областей. // Вестник ЮУрГУ. Серия “Вычислительная математика и информатика”. 2012. N 46(305). 31-44.
- [2] Toselli A., Widlung O. Domain Decomposition Methods – Algorithms and Theory. Springer Series in Comput. Math., 2005.
- [3] Bridson R., Greif C. A multipreconditioned conjugate gradient algorithm. // SIAM J. Matrix Anal. Appl. 2006. 27, N 4. 1056-1068.
- [4] Dubois O., Gander M.J., St-Cyr A., Loisel S., Szyld D. The Optimized Schwarz Method with a Coarse Grid Correction. // SIAM Journal on Scientific Computing. 2012. 34, N 1. 421-458.
- [5] URL:<http://www.ddm.org>
- [6] Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск: Изд. ИВМиМГ СО РАН, 2001.
- [7] Chapman A., Saad Y. Deflated and augmented Krylov subspace technique. // Numer. Linear Algebra Applic. 1997. 4, N 1. 43-66.
- [8] Бутюгин Д.С., Гурьева Я.Л., Ильин В.П., Перевозкин Д.В., Петухов А.В., Скопин И.Н. Функциональность и технологии алгебраических решателей в библиотеке Krylov. // Вестник ЮУрГУ. Серия “Вычислительная математика и информатика”. 2013. 2, N 3. 92-105.
- [9] URL:<http://www2.sccc.ru>
- [10] URL:<https://software.intel.com/en-us/intel-mkl>
- [11] Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. New York: PWS Publ., 1996.

- [12] Ильин В.П. Методы и технологии конечных элементов. Новосибирск:
Изд. ИВМиМГ СО РАН, 2007.