
Иерархическое блочное разбиение для параллельного решения СЛАУ с СПО матрицами

Игорь Коньшин, Сергей Харченко

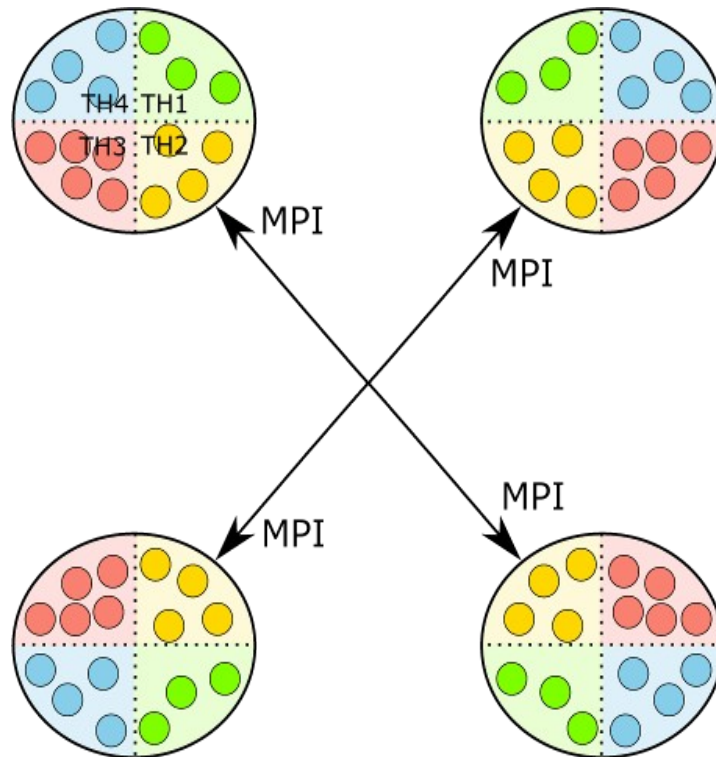
ВЦ РАН, ООО “Тесис”

План

- Архитектура параллельных ЭВМ
- MPI+threads
- IC2-разложение в предобусловливании
- “Геометрическое” разбиение
- “Суперузловое” $b \times b$ -блочное разбиение
- Приложения
- Численные эксперименты
- Выводы

Архитектура параллельных ЭВМ (MPI+threads)

- MPI (для обмена данными между узлами)
- нити TBB (Intel® Threading Building Blocks)



IC2 разложение

Разложение Холецкого 2-го порядка точности (IC2)

$$A = U^T U + U^T R + R^T U,$$

$$H = (U^T U)^{-1}, \quad |u_{ij}| \geq \tau, \quad |r_{ij}| < \tau, \quad 0 < \tau \ll 1.$$

Как вычислить IC2 разложение параллельно?

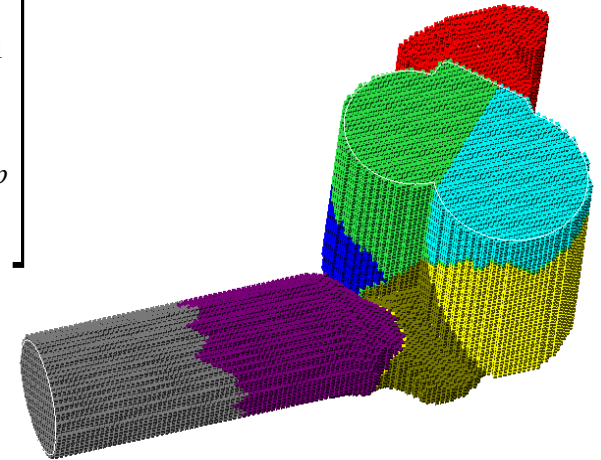
Найти упорядочивание и блочное разбиение для выделения независимых вычислений...

Геометрическое разбиение на подобласти

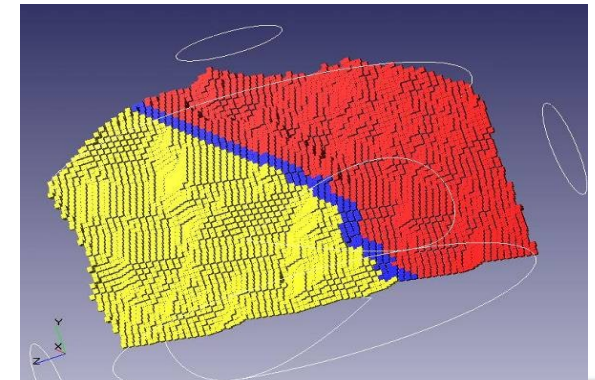
- “Геометрическое” 3D разбиение на p подобластей
- Выделение независимых вычислений в 3D “объемы”
- Оценка структуры разреженности дополнения по Шуру
- Выделение и разбиение 2D разделителей
- Выделение и разбиение 1D разделителей

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & & 0 & C_1 \\ & \ddots & & \vdots \\ 0 & & A_p & C_p \\ B_1 & \cdots & B_p & D \end{bmatrix}$$

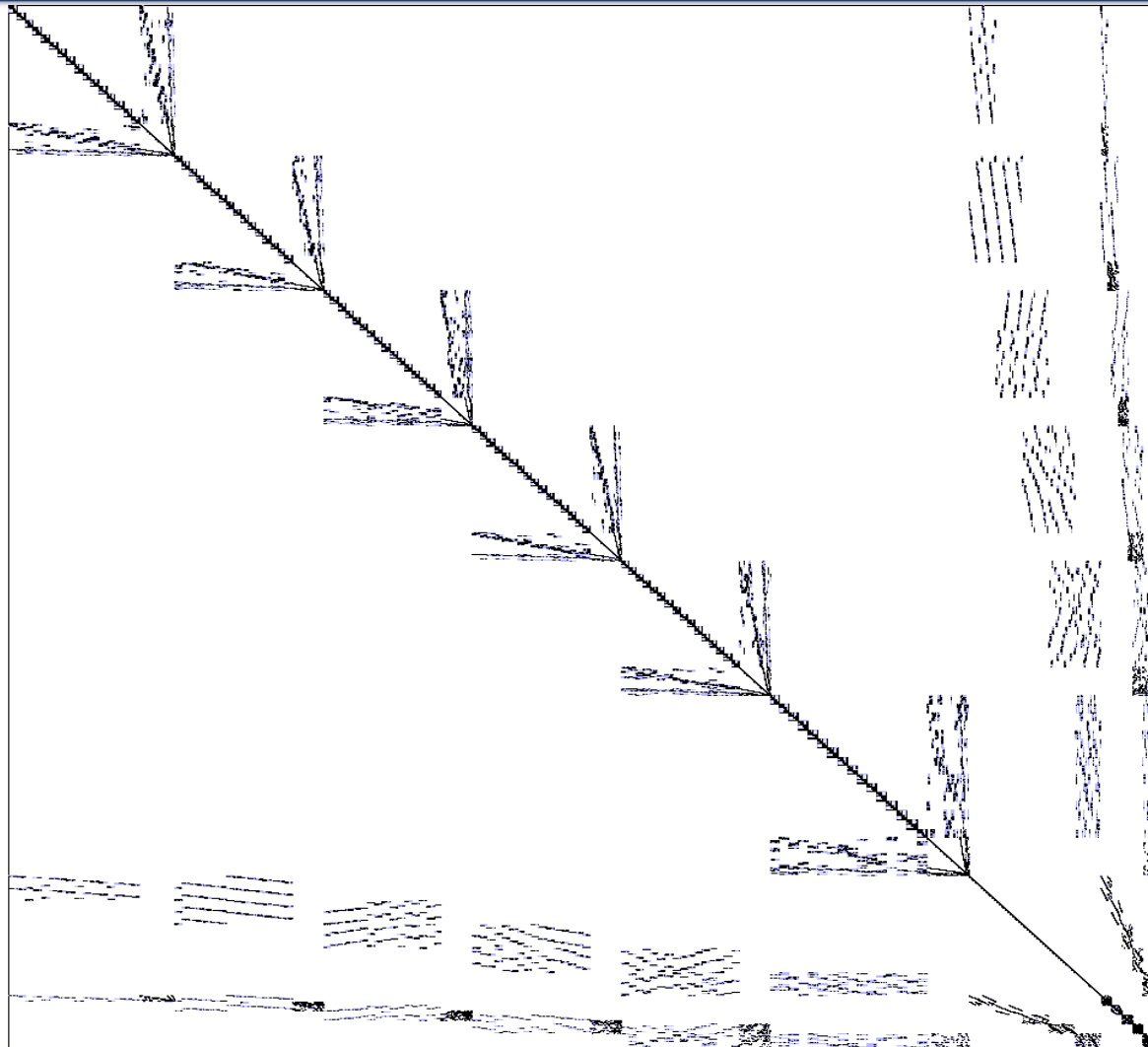
$$S = D - \sum_{i=1}^p B_i A_i^{-1} C_i$$



$$\text{Sp}(\tilde{S}) = \text{Sp}(D) + \sum_{i=1}^p \text{Sp}(B_i) * \text{Sp}((A_i)^{\text{NCYCLE}} C_i)$$



Структура разреженности матрицы после упорядочивания



Суперузловое *bxb*-блочное разбиение

Хранение матриц

- 1×1 – стандартный “точечный” формат
- 2×2 , 3×3 , ..., $b \times b$ – “суперузловые” форматы

Преимущества

- Экономия памяти для структуры разреженности
- Увеличение производительности вычислений за счет явного разворачивания циклов (unrolling)
- Потенциально более устойчивое суперузловое масштабирование

Приложения из строительной механики

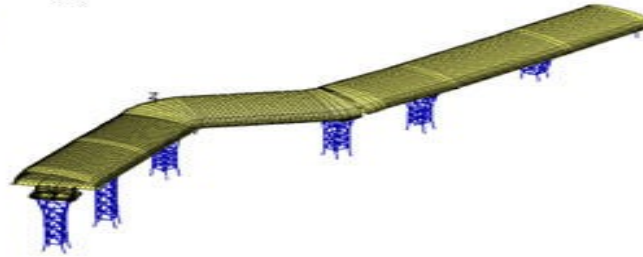
| # | n | b | DShift | τ_1 | τ_2 | Time, c. |
|----|-----------|-----|--------|----------|----------|----------|
| 1 | 40 020 | 3 | 1e-6 | 1e-3 | 1e-6 | 0.42 |
| 2 | 88 782 | 3 | 1e-5 | 3e-3 | 1e-5 | 3.65 |
| 3 | 98 650 | 2 | 1e-6 | 1e-3 | 1e-6 | 8.59 |
| 4 | 112 560 | 3 | 1e-6 | 1e-3 | 1e-6 | 4.10 |
| 5 | 195 024 | 3 | 1e-6 | 1e-3 | 1e-6 | 10.4 |
| 6 | 247 542 | 3 | 1e-5 | 3e-3 | 1e-5 | 17.0 |
| 7 | 256 572 | 3 | 1e-5 | 3e-3 | 1e-5 | 16.8 |
| 8 | 397 950 | 3 | 1e-4 | 1e-2 | 1e-4 | 53.6 |
| 9 | 427 014 | 3 | 1e-6 | 1e-3 | 1e-6 | 41.6 |
| 10 | 755 592 | 3 | 1e-7 | 3e-4 | 1e-7 | 101. |
| 11 | 798 230 | 2 | 3e-4 | 3e-3 | 1e-5 | 242. |
| 12 | 889 890 | 3 | 1e-5 | 3e-3 | 1e-5 | 72. |
| 13 | 1 623 600 | 3 | 1e-10 | 1e-5 | 1e-10 | 113. |
| 14 | 2 534 446 | 2 | 1e-6 | 1e-3 | 1e-6 | 431. |
| 15 | 3 247 200 | 3 | 1e-10 | 1e-5 | 1e-10 | 351. |
| 16 | 4 870 800 | 3 | 1e-12 | 1e-6 | 1e-12 | 823. (*) |
| 17 | 8 033 520 | 3 | 1e-8 | 1e-6 | 1e-10 | 766. (*) |

Происхождение задач

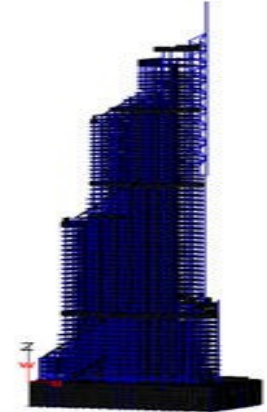
модель 1



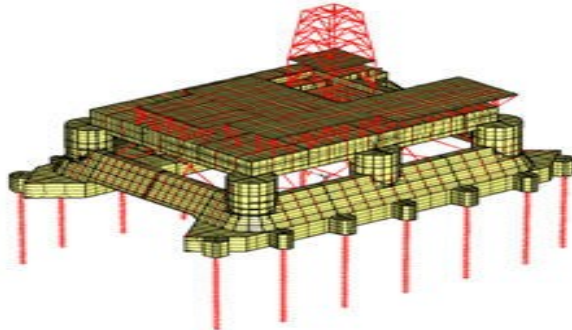
модель 4



модель 10



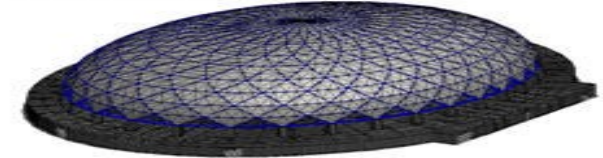
модель 3



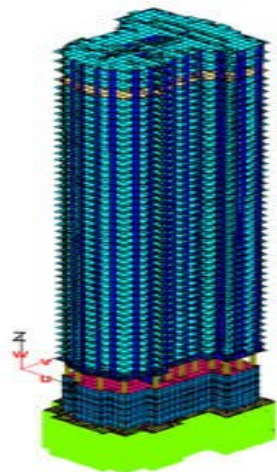
модель 14



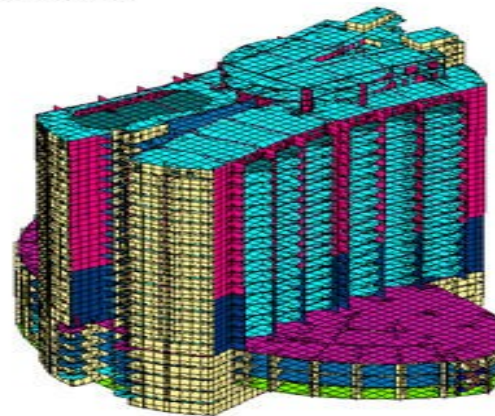
модель 12



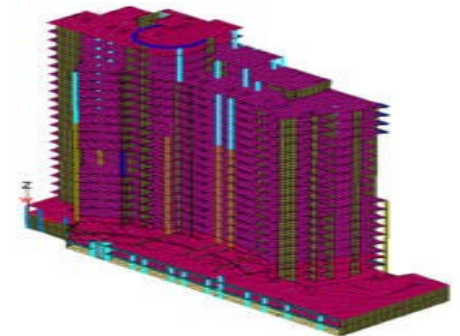
модель 9



модель 7



модель 5



Обусловленность масштабированной матрицы

| # | N | Cond |
|----|-----------|--------------------|
| 9 | 427 014 | 3×10^9 |
| 13 | 1 623 600 | 2×10^{10} |
| 15 | 3 247 200 | 8×10^{11} |
| 16 | 4 870 800 | 4×10^{12} |
| 17 | 8 033 520 | 3×10^{13} |

Характерная гистограмма собственных значений:

| | | | | | |
|--------------|-----------|-----------|-----------|-----|--------|
| С.З.: | 10^{-8} | 10^{-7} | 10^{-6} | ... | 1 |
| КОЛ-ВО С.З.: | 10^1 | 10^2 | 10^3 | ... | 10^6 |

Размер блока b для Задачи 13

| b | $\frac{nzA(b)}{nzA(1)}$ | $\frac{nzU(b)}{nzAU(b)}$ | # Iter | Time (Prec), с. | Time (Iter), с. | Time, с. |
|-----|-------------------------|--------------------------|--------|--------------------|--------------------|-------------|
| 1 | 1.00 | 7.40 | 58 | 393.3 | 146.0 | 539.3 |
| 2 | 1.60 | 7.47 | 55 | 83.8 | 81.9 | 165.7 |
| >3< | 2.05 | 7.28 | 60 | 46.0 | 77.0 | >123.0< |
| 4 | 2.62 | 7.24 | 61 | 51.3 | 84.7 | 136.0 |
| 5 | 3.20 | 7.05 | 60 | 58.6 | 79.6 | 138.2 |
| 6 | 2.16 | 7.46 | 65 | 60.1 | 96.1 | 156.2 |
| 8 | 3.87 | 6.37 | 54 | 119.3 | 96.2 | 215.5 |
| 10 | 4.42 | 6.25 | 55 | 129.7 | 107.0 | 236.7 |

Время решения для RHS #1 и #2 (Задача 13)

| Итерационный метод | # right-hand side | # Iter | Time, c. |
|--------------------|---|--------|----------|
| CG | 1 | 400 | 199.3 |
| | 2 | 402 | 199.4 |
| SOFGMRES | 1 | 337 | 348.6 |
| | 2 (подпространство сохранено из #1) | 45 | 48.5 |

Время решения для MPI+threads

Прес+Iter (#Iter)

| # | 1 (1x1) | 2 (1x2) | 4 (1x4) | 8 (2x4) | 16 (4x4) | 32 (8x4) |
|---|----------------|----------------|----------------|-----------------|-------------|--------------|
| 1 | 0.45+0.73 (38) | 0.23+0.83 (66) | 0.13+0.51 (66) | 0.08+0.97 (187) | - | - |
| 2 | 2.5+4.0 (62) | 1.2+5.1 (126) | 0.7+3.3 (126) | 0.3+2.9 (197) | - | - |
| 3 | 7.9+11.5 (107) | 3.8+15.3 (248) | 2.0+10.0 (248) | - | - | - |
| 4 | 3.1+7.5 (90) | 1.6+6.3 (123) | 0.8+4.3 (124) | 0.5+4.0 (209) | - | - |
| 5 | 11+8 (48) | 6+15 (150) | 3+10 (150) | 2+12 (243) | 1+9(363) | 0.4+7.8(473) |
| 6 | 13+17 (88) | 8+13 (117) | 5+9 (117) | 2+9 (200) | - | - |
| 7 | 20+16 (82) | 10+11 (96) | 6+7 (96) | 3+6 (139) | 1+7(221) | - |
| 8 | 35+74 (198) | 18+55 (198) | 10+34 (198) | 5+18 (204) | - | - |
| 9 | 30+55 (160) | 19+53 (218) | 12+31 (218) | - | - | - |

Время решения для MPI+threads

Прес+Iter (#Iter)

| # | 1 (1x1) | 2 (1x2) | 4 (1x4) | 8 (2x4) | 16 (4x4) | 32 (8x4) |
|----|--------------|--------------|--------------|-------------|-------------|-------------|
| 10 | 135+168(180) | 75+140(240) | 49+100(240) | 23+92(400) | 11+91(630) | 6+78(840) |
| 11 | 174+191(173) | 88+135(177) | 116+126(197) | - | - | - |
| 12 | 39+75(98) | 19+52(99) | 12+42(101) | 8+20(99) | - | - |
| 13 | 165+60(30) | 86+63(46) | 44+56(46) | 21+37(46) | 12+23(45) | - |
| 14 | 443+476(141) | 256+536(181) | 132+349(206) | - | - | - |
| 15 | 332+754(160) | 169+580(160) | 90+508(164) | 48+287(176) | 36+157(208) | 23+151(367) |
| 16 | - | - | 137+686(139) | - | - | - |
| 17 | - | - | - | - | 96+670(350) | - |

Выводы

- Рассмотренные задачи являются чрезвычайно плохо обусловленными
- Итерационные методы способны решить все задачи
- Требуется несколько уровней блочного разбиения
- Эффективность вычислений и параллельная масштабируемость вполне разумны

Планы на будущее

- Высокоточные вычисления
- Дополнительный уровень блочного разбиения для GPU
- Блочные итерационные алгоритмы

Литература

- [1] S.A.Kharchenko. Influence of parallelization of computations with surface interprocesses boundary on scalability of parallel iterative algorithm for solving systems of linear equations for computational hydrodynamics problem. In: *Proc. of Parallel Computational Technologies Conference (PaVT 2008)*: 494-499, 2008 (in Russian).
- [2] I.E.Kaporin. High Quality Preconditioning of a General Symmetric Positive Definite Matrix Based on its $U^T U + U^T R + R^T U$ decomposition. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 1998, 5, 483-509.
- [3] S.A.Kharchenko, A.Yu.Yeremin. New GMRES(k) type algorithms with explicit restarts and the analysis of their properties based on matrix relations in QR form. *Zap. Nauchn. Sem. POMI*, 2000, v.268, 190-241 (in Russian).
- [4] S.A.Kharchenko. Parallel implementation of an iterative algorithm for solving nonsymmetric linear systems with partial retention of spectral/singular information on explicit restarts. *Numerical Methods and Programming*, 2010, v.11, 373-381 (in Russian).
- [5] Yu.N.Zhuk, V.N.Simbirkin. Program complex STARK ES. *Modern high-rise building*. - Moscow: ITC Moskomarkhitektury, 2007 (in Russian).