Распараллеливание итерационных методов численного решения эллиптического уравнения со смешанными граничными условиями и анализ эффективности полученных параллельных реализаций

Е.А. Данилкин, А.В. Старченко
Томский государственный университет

Обсуждается параллельная реализация трех итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений: метода Зейделя, явного метода Булеева и метода бисопряженных градиентов. Наилучшие результаты по количеству итераций, времени вычислений и масштабируемости показывает метод бисопряженных градиентов, предобусловленный с помощью метода Зейделя с красно-черным упорядочиванием.

Введение

За последнее десятилетие произошел большой скачок в развитии вычислительной техники. На смену постоянному увеличению тактовой частоты процессора пришли идеи параллельной обработки данных и использования многоядерных процессоров и многопроцессорных компьютеров. В США – лидере суперкомпьютерного рынка – уже построен петафлопный суперкомпьютер Roadrunner, использующий помимо идеи параллельной обработки данных комбинацию процессоров AMD Opteron и IBM Cell. В последние несколько лет популярным стало использование GPU для проведения расчетов. Естественно возникает вопрос: а современные численные методы переносятся на новые вычислительные машины, заложен ли в них параллелизм?

Постановка задачи

Сравнение различных методов решения системы линейных алгебраических уравнений осуществлялось на примере численного решения эллиптического уравнения в единичном кубе:

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial \Phi}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial \Phi}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial \Phi}{\partial z}\right)=1 \qquad (1)$$

с граничными условиями Дирихле на границе $x=1$ и условиями Неймана на остальных границах

$$\left.\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right|_{x=0}=0;\Phi\big|_{x=1}=0;\left.\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right|_{y=0}=0;\left.\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right|_{y=1}=0;\left.\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right|_{z=0}=0;\left.\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right|_{z=1}=0\,, \quad (2)$$

где $D=1000$ *if* $0{,}1<x,y,z<0{,}9$ *else* $D=1$. Шаг сетки выбирался из условия, чтобы система линейных уравнений имела $120\times120\times120$ неизвестных. Использовалось нулевое начальное приближение.

Аппроксимация задачи осуществлялась на основе метода конечного объема с использованием равномерной сетки. Результатом аппроксимации дифференциального уравнения и граничных условий является их дискретный аналог – система линейных алгебраических уравнений, записанная в следующем виде:

$$\begin{aligned} ap_{i,j,k}\Phi_{i,j,k}+ae_{i,j,k}\Phi_{i+1,j,k}+an_{i,j,k}\Phi_{i,j+1,k}+at_{i,j,k}\Phi_{i,j,k+1}+\\ +aw_{i,j,k}\Phi_{i-1,j,k}+as_{i,j,k}\Phi_{i,j-1,k}+ab_{i,j,k}\Phi_{i,j,k-1}=b_{i,j,k}. \end{aligned} \quad (3)$$

Методы решения сеточных уравнений

Метод Зейделя. Для рассматриваемой задачи формулы метода Зейделя примут следующий вид:

$$\Phi^{n+1}_{i,j,k}=\frac{1}{ap_{i,j,k}}\begin{pmatrix} b_{i,j,k}-ae_{i,j,k}\Phi^{n}_{i+1,j,k} & -aw_{i,j,k}\Phi^{n+1}_{i-1,j,k}\\ -an_{i,j,k}\Phi^{n}_{i,j+1,k} & -as_{i,j,k}\Phi^{n+1}_{i,j-1,k}\\ -at_{i,j,k}\Phi^{n}_{i,j,k+1} & -ab_{i,j,k}\Phi^{n+1}_{i,j,k-1} \end{pmatrix}; \quad (4)$$

$$i=0,\ldots,Nx+1;\quad j=0,\ldots,Ny+1;\quad k=0,\ \ldots,Nz+1,$$

где n – номер итерации метода.

Метод бисопряженных градиентов (BiCGStab). Этот метод широко используется на практике и построен на основе выбора итерационных параметров из условия минимизации функционала, определяющего точность текущих последовательных приближений.

Перед началом итерационного процесса задаются входные данные: $r^0=b-A\Phi^0$; $\hat{r}^0$ – произвольный вектор, для которого $\left(\hat{r}^0,r^0\right)\neq0$, например, $\hat{r}^0=r^0$, $\rho_0=\alpha=\omega_0=1$, $v^0=p^0=0$;

$$\rho_i = \left(\hat{r}^0, r^{i-1}\right);$$
$$\beta_i = \left(\rho_i / \rho_{i-1}\right)\left(\alpha / \omega_{i-1}\right);$$
$$p^i = r^{i-1} + \beta_i \left(p^{i-1} - \omega_{i-1} v^{i-1}\right);$$
$$v^i = Ap^i;$$
$$\alpha = \rho_i / \left(\hat{r}^0, v^i\right);$$
$$s = r^{i-1} - \alpha v^i;$$
$$t = As;$$
$$\omega_i = \left(t, s\right) / \left(t, t\right);$$
$$\Phi^i = \Phi^{i-1} + \alpha p^i + \omega_i s;$$
$$r^i = s - \omega_i t.$$

Затем стартует итерационный процесс, который продолжается до тех пор, пока не будут выполнены условия сходимости.

Метод бисопряженных градиентов рассчитан на решение систем с несимметричной и знаконеопределенной в общем случае матрицей. На практике для ускорения сходимости используется процедура предобуславливания, которая состоит в замене исходной плохообусловленной системы $A\Phi = b$ системой $M^{-1}A\Phi = M^{-1}b$ с хорошим числом обусловленности [1].

Явный метод Булеева. Для решения системы линейных алгебраических уравнений с ленточной семидиагональной матрицей (3) используются рекуррентные формулы:

$$\Phi_{i,j,k} = +P_{i,j,k}\Phi_{i+1,j,k} + Q_{i,j,k}\Phi_{i,j+1,k} + R_{i,j,k}\Phi_{i,j,k+1} + T_{i,j,k};$$
$$i = Nx+1,0;\ \ j = Ny+1,0;\ \ k = Nz+1,0, \qquad (5)$$

где $P_{i,j,k}$, $Q_{i,j,k}$, $R_{i,j,k}$, $T_{i,j,k}$ – прогоночные коэффициенты, определяемые из:

$$\begin{cases} P_{i,j,k} = ae_{i,j,k} / sum; \\ Q_{i,j,k} = an_{i,j,k} / sum; \\ R_{i,j,k} = at_{i,j,k} / sum; \\ T_{i,j,k} = (aw_{i,j,k}(Q_{i-1,j,k}\Phi_{i-1,j+1,k} + R_{i-1,j,k}\Phi_{i-1,j,k+1} + T_{i-1,j,k}) + \\ \quad + as_{i,j,k}(P_{i,j-1,k}\Phi_{i+1,j-1,k} + R_{i,j-1,k}\Phi_{i,j-1,k+1} + T_{i,j-1,k}) + \\ \quad + ab_{i,j,k}(P_{i,j,k-1}\Phi_{i+1,j,k-1} + Q_{i,j,k-1}\Phi_{i,j+1,k-1} + T_{i,j,k-1}) + b_{i,j,k}) / sum; \\ sum = ap_{i,j,k} - aw_{i,j,k}P_{i-1,j,k} - as_{i,j,k}Q_{i,j-1,k} - ab_{i,j,k}R_{i,j,k-1}; \\ i = 0, Nx+1, \;\; j = 0, Ny+1, \;\; k = 0, Nz+1. \end{cases} \quad (6)$$

Таким образом, каждая итерация состоит из двух этапов: прямого (6) и обратного (5) хода. Во время прямого хода вычисляются значения прогоночных коэффициентов. Обратный ход состоит из расчета величин сеточной функции.

Распараллеливание итерационных методов решения СЛАУ и анализ эффективности полученных реализаций

При распараллеливании используется принцип геометрической декомпозиции сеточной области. В рассматриваемом случае возможны три различных способа разделения значений сеточной функции по вычислительным узлам – одномерная схема, двухмерное или трехмерное разбиение узлов вычислительной сетки. Каждому процессорному элементу вместе с выделенной сеточной подобластью распределяются все значения сеточной функции $\Phi^n_{i,j,k}$, принадлежащие этой подобласти.

Параллельная реализация метода Зейделя. Использование последних рассчитанных значений в методе Зейделя увеличивает скорость сходимости, но ограничивает параллелизм алгоритма и требует синхронизации параллельных вычислений. На практике допустимо использование асинхронного варианта метода Зейделя, в котором на границе подобластей декомпозиции используются данные с предыдущей итерации. Он часто оказывается эффективным, но при его использовании не представляется возможным проведение анализа сходимости численного метода.

Как приемлемая альтернатива используется обход узлов вычислительной сетки в шахматном порядке (красно-черное упорядочивание), такой способ разделения обусловлен выбором используемого конечно-разностного шаблона, в соответствии с которым для расчета в красных

узлах нужны значения в черных узлах и наоборот, что снимает вопрос о синхронизации параллельных вычислений [2].

Параллельная реализация метода BiCGStab. Этот метод не требует никаких других операций, кроме матрично-векторного произведения, вычисления скалярных произведений и сложения векторов. Все эти операции позволяют эффективно применять параллельные вычисления на компьютере с распределенной памятью. Параллельная реализация метода бисопряженных градиентов для систем с ленточными матрицами требует пересылок, а именно обмена приграничными значениями с границы подобластей декомпозиции для обеспечения однородности вычислений и сбора частичных сумм скалярного произведения со всех процессоров и рассылки полученного результата на все процессорные элементы.

Параллельная реализация явного метода Булеева. Параллельное решение сеточных уравнений методом Булеева при 1D, 2D или 3D декомпозиции расчетной области оказывается невозможным, потому как использование этого метода напрямую подразумевает многократный переход от одного узла расчетной сетки к другому через всю расчетную область. В работе [3] предложен способ решения этой проблемы. Идея преодоления этой сложности состоит в следующем: прямой и обратный ход метода Булеева организуется не по всей области, а по подобластям, получившимся в результате декомпозиции расчетной области. При этом в качестве граничных условий используются по аналогии с асинхронным методом Зейделя значения с последней итерации. В [3] показано, что при использовании данного подхода количество итераций возрастает незначительно (10 %).

Результаты тестирования методов решения СЛАУ

Результаты сравнения показали, что для задач большой размерности только метод Зейделя с красно-черным упорядочиванием при распараллеливании целиком повторяет процесс сходимости последовательного алгоритма, что выражается в сохранении количества итераций, требующихся для сходимости метода, вне зависимости от числа использованных процессоров и способа декомпозиции. Важно отметить, что рассматриваемая реализация алгоритма очень хорошо масштабируется на любое разумное количество вычислительных узлов.

Параллельная реализация методов сопряженных и бисопряженных градиентов теоретически также не нарушает процесс сходимости последовательного алгоритма. Но на практике обнаруживается, что количество итераций случайным образом меняется при различных спо-

собах декомпозиции. Численные эксперименты показали, что это является следствием некоммутативности в случае машинной арифметики вычисления суммы большего количества слагаемых. Появляется небольшая погрешность в седьмом или восьмом знаке, что в дальнейшем приводит к изменению хода итерационного процесса. Необходимо отметить, что сам итерационный процесс в конце концов сходится, при этом лишь незначительно меняется получение последовательности приближений к решению.

Параллельный алгоритм метода Булеева для поставленной задачи работает корректно в том случае, если не используется разбиение области по оси Ox и тем самым допускает использование лишь 1D и 2D декомпозиции.

На рис. 1 показано, что метод бисопряженных градиентов с предобуславливанием методом Зейделя с красно-черным упорядочиванием является наиболее эффективным с точки зрения временных затрат и расчет на одном процессоре занимает столько же времени, сколько 64-процессорный вариант любого другого рассматриваемого метода.

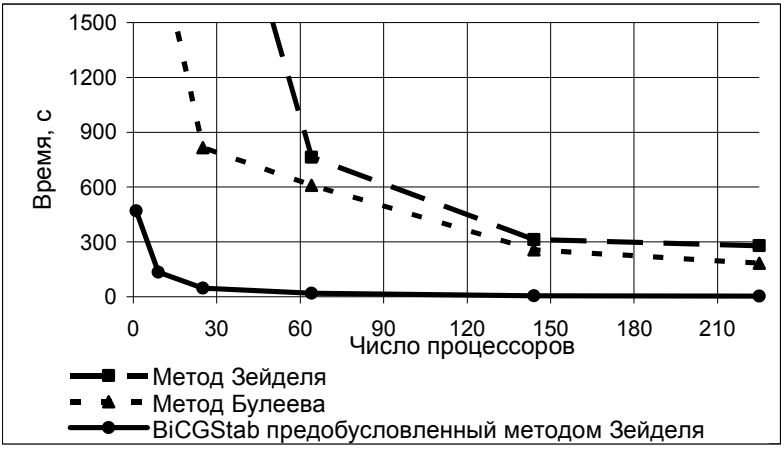


Рис. 1. Время работы параллельной программы в зависимости от используемого количества вычислительных узлов для рассматриваемых методов

Метод Зейделя с красно-черным упорядочиванием и метод Булеева сходятся к решению более равномерно, но требуют значительного количества итераций: 68373 – метод Булеева и 200756 – метод Зейделя, в то время как метод бисопряженных градиентов с предобуславливанием методом Зейделя сходится за 198 итераций.

Также необходимо отметить, что количество итераций для сходимости методов Булеева и бисопряженных градиентов, предобусловленного методом Зейделя, увеличивается на 35 % при увеличении количества вычислительных узлов до 225.

Максимальную эффективность показывают методы Зейделя с красно-черным упорядочиванием и метод бисопряженных градиентов, предобусловленный методом Зейделя, чуть хуже показатели у метода Булеева. Метод бисопряженных градиентов с предобуславливанием по Булееву показывает низкую эффективность вследствие значительного увеличения количества итераций, требующихся для сходимости метода, при росте количества используемых процессоров.

Выводы

На основе полученных результатов можно сделать вывод, что наилучшим вариантом для решения выбранной задачи на многопроцессорной вычислительной машине с распределенной памятью является использование метода бисопряженных градиентов с предобуславливанием методом Зейделя.

Литература

1. **Van der Vorst H.A.** Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetrical linear systems: Preprint 633. Univ.Utrecht., 1990.
2. **Беликов Д.А., Говязов И.В., Данилкин Е.А. и др.** Высокопроизводительные вычисления на кластерах. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2008. 198 с.
3. **Богословский Н.Н., Есаулов А.О., Старченко А.В.** Параллельная реализация алгоритма вычислительной гидродинамики SIMPLE // Труды Сибирской школы-семенара по параллельным вычислениям. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. С. 118-124.