

УДК 004.428

РЕШЕНИЕ СЛАУ В ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСАХ ИТМФ АЛГЕБРАИЧЕСКИМИ МНОГОСЕТОЧНЫМИ МЕТОДАМИ

*А. П. Карнов, Ю. Г. Бартенев, В. А. Ерзунов, Д. А. Петров, А. Н. Стаканов,
Е. Б. Щаникова*

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, Саров

В докладе даётся краткое описание результатов апробации и сравнения нескольких параллельных предобуславливающих алгебраических многосеточных методов (AMG) и блочных ILU при решении задач по модулю ЛОГОС-Тепло, комплексу программ НИМФА и некоторым методам ВНИИЭФ, включающих решение уравнения теплопроводности неявными методами на регулярных и нерегулярных сетках. Показана возможность ускорения счета задач путем применения селективного AMG и агрегативного AMG (AgAMG) библиотеки PMLP/ParSol и BoomerAMG библиотеки hypre с редким перестроением структуры грубых матриц при решении потока СЛАУ на участках счета, порождающих сложные СЛАУ, что значительно сокращает затраты на построение AMG. В ряде случаев более быстрое решение СЛАУ в параллельном многопоточном режиме обеспечивает неполная ILU-факторизация локальных матриц процессов задачи, расширенных односторонним наложением и согласованием поправок по методу И.Е.Капорина. Оба типа методов показывают своё преимущество в том или ином случае при решении. Поэтому возникает задачезависимая проблема выбора наискорейшего метода, которая или отчасти решается сочетанием обоих методов при предобуславливании каждой СЛАУ двух-стадийным методом CPR, или заданием множества параметров предобуславливания, включая оба типа AMG- и ILU-предобуславливания, которые автоматически подбираются в ходе расчета с целью минимизации времени решения СЛАУ.

Ключевые слова: разреженные матрицы, система линейных алгебраических уравнений СЛАУ, вычислительные системы с распределённой памятью и общей памятью, методы предобуславливания: параллельные алгебраические многосеточные, Шварца, ILU-разложения, Coarse Grid Correction, CPR, адаптивное предобуславливание.

Введение

Параллельный алгебраический многосеточный метод (AMG) итерационного решения СЛАУ значительно снизил вычислительные затраты на решение СЛАУ при решении задач аэрогидродинамики пакетом ЛОГОС [1] по сравнению с итерационным решателем, предобусловленным неполным разложением (ILU) матрицы СЛАУ.

Процесс применения и разработки алгебраических многосеточных методов во ВНИИЭФ развивался следующим образом. В 2010 г. мы проверили BoomerAMG из библиотеки *hypre* [2] LLNL на СЛАУ гидродинамики *ЛОГОС Simple* [3] и на СЛАУ гидрогеологии *НИМФА* [4]. В обоих случаях BoomerAMG + CG опередил использовавшийся ILU+CG комплекса библиотек *LParSol* [5].

Поэтому мы:

- в 2010 г. подключили BoomerAMG в *LParSol*: СЛАУ в *ЛОГОС Simple* стали решаться гораздо быстрее, но *ЛОГОС Simple* всё ещё заметно отставал от зарубежных аналогов по затратам времени и памяти;
- в 2011 г. испытали последовательный AMG библиотеки *ParallelToolbox* [6];

- в 2013 г. реализовали в LParSol параллельный вариант подобного AMG-предобусловливания на основе одностороннего перекрытия локальных матриц пирамиды с расщеплением уравнений в перекрытии, добавив ряд возможностей.

Другими коллективами разработаны:

- предобусловливатель AML в модуле Newt [7] и проверен в пакете НИМФА (2012 г.);
- решатель AgAMG агрегативного типа в ЛОГОС SIMPLE [8] со специализированным окончанием итераций, который превзошел BoomerAMG+CG и AMG + CG (2012 г.);
- решатель AgAMG в ЛОГОС TVD для мелкоблочных СЛАУ с ведущей неизвестной (2013 г.), которые не могли решать библиотечные варианты.

Впоследствии мы перенесли AgAMG из ЛОГОС в PMLP/ParSol [9] с OpenMP-доработками для применения в качестве предобусловливателя в других комплексах ИТМФ.

После успешного применения многосеточных методов в задачах гидродинамики мы занялись их доработками и испытаниями на других задачах и СЛАУ. Помимо смешанной схемы распараллеливания в AMG и экономичного предобусловливания был реализован упрощенный двухсеточный метод – грубосеточная корректировка [16]. Кроме этого для мелкоблочных матриц в настоящее время реализован и испытывается расщепленный CPR, в частности CPR-AMG [17].

Также в PMLP идет реализация предобусловливателя AMG на основе некоторых методов из BoomerAMG.

Это привело к проверке эффективности разных AMG (AMG, AgAMG, CPR_AMG, BoomerAMG) в итерационных решателях CG и BiCGStab и сравнению с параллельными блочными вариантами ILU на базе метода И.Е.Капорина [10] для решения СЛАУ

$$A \times x = b \text{ с точностью } \|A \times x - b\| / \|b\| \leq \varepsilon, \varepsilon = 10^{-5} \div 10^{-8}$$

в комплексах: ЛОГОС Тепло [11] для расчета диффузии тепла в твердом теле, НИМФА [12] для расчета многофазных течений в пористой среде, методиках МЕДУЗА [13], MPC [14] и МИМО-ЗА [15] для расчета лучистой теплопроводности, что и является основным содержанием доклада.

Описание алгоритма

Многосеточные методы в комплексе библиотек параллельных решателей LParSol применяются в качестве предобусловливателей итерационных решателей с целью понижения числа обусловленности матрицы. Предобусловливание состоит из двух этапов: построение до начала итераций и применение на итерациях. В нашей работе в качестве альтернативы AMG выступали методы на основе неполного LU-разложения. На рис. 1 представлена работа, выполняющаяся на каждом этапе обоих видов предобусловливания.



Предобусловливание: построение (setup) + применение (apply):

- setup AMG – построение пирамиды приближенных матриц уменьшающегося размера
- apply AMG – рекурсивное приближенное решение на каждом уровне пирамиды
- setup ILU – неполное LU-разложение исходной матрицы
- apply ILU – решение треугольных систем с L и U

Рис. 1. Основные действия предобусловливания

Напомним, AMG является многоуровневой конструкцией, образующей пирамиду СЛАУ (матриц), начиная с исходной и заканчивая самой грубой СЛАУ. Каждый следующий уровень пирамиды представлен СЛАУ, состоящей из вектора правой части меньшего размера, и матрицы, содержащей меньшее число коэффициентов. На каждом уровне AMG селективного типа из всего набора неизвестных выделяется подмножество (грубых) неизвестных. Найденные значения подмножества интерполируются на исходное множество неизвестных с помощью прямоугольной матрицы пролонгации P размером $N_c \times M_c$, где $N_c > M_c$. Выделение подмножества грубых неизвестных осуществляется путем умножения матрицы рестрикции (огрубления) R на вектор, которая в рассмотренных нами методах есть $R = P^T$. Матрицу R (или P) можно по-разному строить. Например, в AMG доступен только один способ определения подмножества неизвестных, в BoomerAMG несколько способов (определяется параметром coarsen type).

AMG хорошо описан в литературе. Основными алгебраическими операциями в нем являются вычисление грубой матрицы $A_c = P^T \times A_f \times P$ и грубой правой части $r_c = P^T \times r_f$, приближенное решение грубой СЛАУ $A_c \times x_c = r_c$ (сглаживание правой части), интерполяция грубой поправки решения $r_f = P \times r_c$ и сглаживание x_f путем приближенного решения СЛАУ $A_f \times x_f = r_f$. В AMG агрегативного типа вместо выделения грубых неизвестных среди всех неизвестных определяется грубые неизвестные, объединяющие (агрегирующие) несколько подробных неизвестных (в основном, 2, 4, 8 – параметр AgAMG). В отличие от AMG селективного типа каждая подробная неизвестная может входить только в одно объединение (в одну грубую неизвестную), что приводит к построению более разреженных грубых матриц по сравнению с AMG селективного типа, но одновременно к требованию более качественного сглаживания.

Отметим, что в наших реализациях AMG и AgAMG имеется возможность упрощенного построения пирамиды грубых матриц для последовательности подряд идущих СЛАУ, матрицы которых обладают одинаковым портретом (одинаковой структурой разреженности). При решении следующей СЛАУ можно не выполнять весьма затратную и слабо параллельную работу по определению грубых неизвестных на каждом уровне, а использовать результаты этой работы, выполненной для предыдущей СЛАУ. Это приводит к ухудшению качества предобусловливания текущей СЛАУ (может увеличить число итераций), но может значительно сократить затраты на её решение, т. к. матрицы P и R всех уровней предыдущей СЛАУ совпадут с аналогичными матрицами текущей СЛАУ и могут переиспользоваться. Это можно назвать «заморозкой» пирамиды матриц P на несколько СЛАУ. Этот режим мы обозначаем $P = \text{const}$, отмечая явно или косвенно число решаемых таким образом СЛАУ. Все грубые матрицы A_c пирамиды текущей СЛАУ будут обладать разными значениями коэффициентов, но одинаковой с предыдущей СЛАУ структурой разреженности, что позволяет дополнительно применить при необходимости выработанное ранее оптимизирующее упорядочивание грубых матриц (например, для «раскраски» в интересах многопоточного сглаживания). Аналогичный прием заморозки P был реализован нами и в BoomerAMG. Сразу стоит отметить, что это значительно ускорило решение СЛАУ во всех проведенных нами экспериментах, в которых многосеточные методы оказались способны решать СЛАУ. Ускорение достигается при условии управления параметром заморозки либо самим пользователем, либо адаптивным механизмом LParSol. Адаптивный механизм возобновляет полное построение AMG, как только затраты на решение предыдущей СЛАУ в режиме $P = \text{const}$ начинают противоречить заданным критериям экономичности предобусловливания. Имеются и возможности ограничения огрубления, свойственные многосеточным методам: управление силой связи неизвестных¹, управление числом уровней, переходом в однопроцессный режим для работы с малыми грубыми матрицами пирамиды и др.

Среди всего многообразия СЛАУ, вырабатываемых приложениями ИТМФ, многосеточные предобусловливатели не способны решать СЛАУ с несколькими равноправными неизвестными в каждой ячейке сетке, например, с искомыми компонентами вектора перемещения в задачах стационарной прочности.

¹ ϵ – коэффициент для выделения подмножества сильно связанных неизвестных (epsilon в AMG и strong threshold в BoomerAMG). В AMG, например, неизвестная j обладает сильной связью с неизвестной i , если $|A_{ij}| > \epsilon * |A_{ii}|$, в BoomerAMG – если $|A_{ij}| \geq \epsilon * \max_i |A_{ij}|$, $i \neq j$.

Параллельные ILU-предобусловливатели PMLP/ParSol – это блочные (с перекрытием и без) ILU_0 / IC_0 , $ILU_t / IC_t / IC_2$ представленные, например, в работе [9].

Результаты расчётов

Первая задача – задача методики МИМОЗА на кубической эйлеровой сетке, СЛАУ состоит из 72 миллионов уравнений, распределенной на 24 вычислительных узла по 4 MPI-процесса, в которых используется несколько нитей для OpenMP-распараллеливания. На рис. 2 показаны графики времени счета шага методики МИМОЗА для расчета процессов газовой динамики и теплопроводности при формировании 7- или 27-точечных матриц.

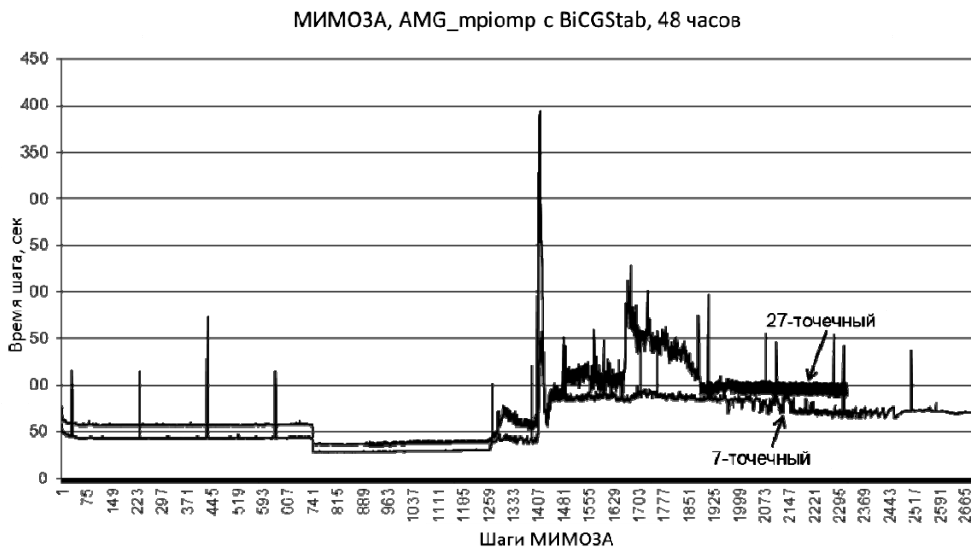


Рис. 2. Решение задачи методикой МИМОЗА

В задаче не все СЛАУ обладают одинаковой сложностью. Для самых простых можно применять простой предобусловливатель Якоби, для сложных – многосеточный метод в режиме сохранения портрета на несколько СЛАУ. Для простых также подходит AMG, но в режиме сохранения портрета на большее количество СЛАУ. Время счета задачи с 27-точечным шаблоном не уложилось в 48 часов, с 7-точечным составило 44 часа. При счете с Якоби на начальном участке задачи время уменьшилось ещё на 1 час.

В этой задаче были записаны серии СЛАУ с 4 участков сложного этапа счета для дополнительных исследований. Проверили разные AMG. На самом сложном участке (в районе 1410 шага) при использовании 27-точечного шаблона аппроксимации BoomerAMG+BiCGStab за счет малого числа итераций имел преимущество перед AMG+BiCGStab, на трех других участках преимуществом обладал AMG+BiCGStab, как показано² в табл. 1 и 2. Отметим, что на этом участке решение задачи с предобусловливателем AMG($\epsilon = 0,025$) было гораздо экономичнее решения с блочным предобусловливателем Якоби с ILUt, и только при адаптивном усилении грубосеточной корректировкой последний из них составил конкуренцию на коротком участке счета.

² В таблицах используются сокращенные обозначения параметров многосеточных методов: **c** – тип огрубления: PMIS; **i** – тип интерполяции: **ext** – расширенная классическая модифицированная интерполяция; **s** – сглаживатель: **Jac** – Якоби, **SGS** – симм. Гаусс-Зейдель, **Ch2** – полином Чебышева 2-й степени, **hyb** – гибридный симметричный Гаусса-Зейделя или SSOR; **n** – допустимый размер грубой матрицы.

Таблица 1

Поведение решателя BiCGStab с разным предобусловливанием в начале сложного участка

Предобусловливатель	Число СЛАУ с $P = \text{const}$	Среднее число итераций	Среднее время решения, сек
AMG($\epsilon = 0.0125, \dots$)	5	36.6	4.78
AMG($\epsilon = 0.025, \dots$)	5	38.9	4.89
BoomerAMG ($s = \text{hybridSGS}, \dots$)	5	8.7	2.79
BoomerAMG ($s = \text{Cheby2}, \dots$)	5	1.2	1.97
AMG($\epsilon = 0.05, \dots$)	5	41.5	5.47
AMG($\epsilon = 0.05, \dots$)	1	41.7	7.30

В табл. 2 демонстрируется результат решения нескольких СЛАУ в конце сложного участка счета (с 2109 шага). В этой таблице выделены результаты, показывающие, что число итераций изменяется слабо при использовании режима ограниченной заморозки P .

Таблица 2

Поведение решателя BiCGStab с разным предобусловливанием в конце сложного участка

Предобусловливатель	Число СЛАУ с $P = \text{const}$	Среднее число итераций	Среднее время решения, сек
AMG($\epsilon = 0.0125, \dots$)	3	11.6	1.97
AMG($\epsilon = 0.025, \dots$)	3	7.8	1.93
BoomerAMG ($s = \text{hybridSGS}, \dots$)	3	19	4.53
BoomerAMG ($s = \text{Cheby2}, \dots$)	3	2	2.23

В табл. 3 дополнительно показаны характеристики сложности AMG при разном ϵ (в BoomerAMG подобный параметр (strong threshold) во всех экспериментах равнялся 0,25).

Таблица 3

Сложность оператора AMG

epsilon	Grid complexity	Operator complexity	Число уровней
$\epsilon = 0.0$	1.63	2.75	10 (4 на всех MPI + 6 на одном MPI-процессе)
$\epsilon = 0.025$	1.80	3.77	10 (остановка по малости округления)
$\epsilon = 0.05$	2.15	5.33	12 (остановка по малости округления)
$\epsilon = 0.1$	2.76	6.38	12 (остановка по малости округления)

К недостаткам селективных AMG можно отнести большие затраты памяти на пирамиду матриц и связанный с этим большой объем вычислений на 1 итерацию. Эти затраты характеризуются сложностью оператора, т. е. во сколько раз суммарное количество ненулевых коэффициентов (nnz) во всех матрицах пирамиды больше, чем в исходной матрице. Даже при самом агрессивном огрублении в предобусловливателе AMG памяти требуется почти в 3 раза больше, тогда как в ILU0 – в 2 раза больше.

AMG с оптимальными параметрами для решения задачи на ортогональной сетке опробовали в методике МИМОЗА на задаче с косоугольной сеткой. Для этого со сложного участка (по времени решения) записали 4 СЛАУ. Параметры СЛАУ и режима решения: 650 тыс. строк, 14,7 млн. неизвестных, 168 MPI однопоточных процессов, решатель – BiCGStab, $rtol = 1e-8$.

Таблица 4

Решение 4 СЛАУ с одного шага МИМОЗА на косоугольной сетке

Предобусловливатель (параметры)+BiCGStab	Время решения, с.	Число итераций
AMG ($\epsilon = 0,025, \dots$)	0,27	28, 182, 21, 0
AMG ($\epsilon = 0,025$, $ratio_eps_to_0 \neq 0, \dots$)	0,3	2, 21, 1, 0
AgAMG ($s = Jac$, $agg_size = 4, \dots$)	0,41	7, 100, 7, 0
AgAMG ($s = SGS$, $agg_size = 4, \dots$)	0,3	2, 15, 1, 0
AgAMG ($s = SGS$, $agg_size = 2, \dots$)	0,2	2, 13, 1, 0
JacobiBlock (ILUt ($\tau = 1e-3$))	0,08	6, 23, 1, 0
Schwarz (ILUt($\tau = 1e-3$), один слой перекрытия)	0,09	3, 15, 1, 0
JacobiBlock (ILUt ($\tau = 1e-3$), CGC(ILUt1d ($\tau = 1e-3$), ...))	0,99	2, 8, 1, 0

AMG с оптимальными параметрами для предыдущей задачи решил СЛАУ и этой задачи, но AgAMG оказался быстрее AMG, а Шварц с ILUt или блочный Якоби с ILUt ещё быстрее. ILUt в сочетании с грубосеточной корректировкой (последняя строка) решил СЛАУ за наименьшее число итераций, но за значительно большее время. Обычно решение СЛАУ с грубосеточной корректировкой (двухсеточный метод) начинает обгонять (по времени) решение с «односеточным» блочным ILU, когда с последним требуется больше нескольких сотен итераций.

AMG также испытали на СЛАУ и в задаче расчета теплопроводности на трехмерной лагранжево-эйлеровой сетке по методике МИМОЗА, включенной в мультифизический программный комплекс. Решалось 5 раз 8 подряд идущих СЛАУ: 3 млн. строк, 80 млн. неизвестных (27-точечные матрицы), 840 однопоточных MPI-процессов, решатель – BiCGStab.

Таблица 5

Решение СЛАУ на лагранжево-эйлеровой сетке в методике МИМОЗА

Предобусловливатель (параметры)	Время решения, с.	Итераций на 1 СЛАУ (min-max)
AMG ($\epsilon = 0,025$, $s = Jac$)	21,59	30,7 (0 – 50)
AMG ($\epsilon = 0,05$, $s = Jac$)	23,65	30,8 (0 – 51)
JacobiBlock (IC ₀)	13,98	108,2 (0 – 212)
BoomerAMG ($s = hybridSGS, \dots$)	5,45	1,9 (0 – 3)
BoomerAMG ($s = Cheby2, \dots$)	8,60	1,9 (0 – 3)

К этому моменту у нас был реализован адаптивный механизм выбора предобусловливателя, который предпочитал AMG, а не блочный IC₀, хотя он быстрее при постоянной точности решения всех СЛАУ – 10^{-8} . В решателе же использовалась пониженная на 2 порядка точность решения первой СЛАУ расчета нелинейного уравнения теплопроводности (итерациями Ньютона, которых обычно было 3 – 4) на каждом временном шаге МИМОЗА, где AMG имел преимущество перед IC₀. BoomerAMG за счет малого числа итераций оказался самым быстрым и был также включен в набор методов адаптивного предобусловливания, позволив сократить время счета данной задачи в 2 раза (затраты на решение СЛАУ составили ~ 36 % от общего времени счета задачи).

Решение СЛАУ в задачах расчета теплопроводности на адаптивной дробной сетке методики МРС были проведены на двух задачах. Первая задача на 24 миллиона частиц и 3,7 миллиона ячеек, вторая – на 268 миллиона частиц и 40 миллионов ячеек. СЛАУ теплопроводности решалась «на ячейках». В первой задаче использовалось 4 многопоточных MPI-процесса, во второй – 12 многопоточных MPI-процессов. Решение СЛАУ обеих задач отражено в табл. 6 и 7.

Таблица 6

Задача 1, 30 шагов, 4 многопоточных MPI, решение СЛАУ размером 3,7 млн строк

Решатель	Предобусловливатель	Общ/макс итераций	Время решения, сек
BiCGStab	BoomerAMG (s = hybridSGS,...)	2786/59	244
CG	AMG ($\varepsilon = 0, \dots$)	4736/200	366
BiCGStab	AgAMG (s = amcILDU0,...)	6613/180	491
BiCGStab	JacobiBlock (Schwartz_omp (ILU0, ...))	15600/419	540

Таблица 7

Задача 2, 20 шагов, 12 многопоточных MPI, решение СЛАУ размером 40 млн строк

Решатель	Предобусловливатель	Общ/макс итераций	Время решения, сек
BiCGStab	JacobiBlock (Schwartz_omp(ILU0,...))	303/18	94
BiCGStab	BoomerAMG (s = hybridSGS,...)	146/10	141
CG	AMG (s = SGS, ...)	1379/84	230
BiCGStab	AgAMG (s = Jac, ...)	519/26	231

Методы решения в таблицах упорядочены по возрастанию времени решения. В задаче № 1 все варианты AMG оказались быстрее блочных ILU. Здесь СЛАУ намного сложнее, чем на задаче № 2 (видно по большому числу линейных итераций). На более простых СЛАУ задачи № 2 быстрее блочный ILU₀. Здесь, по-видимому, было бы полезно построение и применение адаптивного предобусловливания. Исследованиями в этой части в настоящее время занимаемся совместно с разработчиками методики МРС.

Задачи нефтедобычи, решаемые комплексом НИМФА, могут использовать полностью неявную схему и полунеявную схем. Полностью неявная схема используется в модели «черной нефти» и порождает мелкоблочные матрицы с блоками размером 3×3 . Искомые неизвестными порождается СЛАУ являются 3 зависимые друг от друга компоненты: давление жидкости (ведущая неизвестная) и две насыщенности. В обоих случаях используются нерегулярные сетки.

При использовании полунеявной схемы, порождаются точечные матрицы для нахождения давления жидкости. Решались 3 СЛАУ с SPD-матрицами из этой задачи, выработанные на шаге счета с длительностью $t = 1, 5, 20$ дней. В одной из посчитанных задач агрегативный AMG показал лучший результат, как это видно по табл. 8.

Таблица 8

Задача нефтедобычи, 280 тыс. ячеек (~ 5.8 nnz в строке), 24 однопоточных MPI-процессов

Предобусловливатель	Число итераций, общее (мин-макс)	Время решения, сек
AgAMG($s = \text{DILU}$, $\text{agg_size} = 4, \dots$)	33 (6 – 15)	0,161
JacobiBlock(IC_0)	252 (36 – 136)	0,231
AMG($s = \text{SGS}$, $\varepsilon = 0, \dots$)	33 (8 – 14)	0,257
JacobiBlock($\text{ILU}_{\text{t1d}}(\tau = 0.001)$)	119 (19 – 61)	0,686

В других задачах СЛАУ быстрее всего решались с использованием предобусловливателя AMG. Обычно в комплексе НИМФА для решения таких задач используется блочный предобусловливатель IC_0 (неполный Холецкий), который, как видно, не всегда лучший.

Та же задача считалась с использованием полностью неявной схемы. На ней сравнивалось число итераций BiCGStab с блочным $\text{ILDU}_{\text{bcst}}$, который в НИМФА используется по умолчанию (здесь постфикс bcst означает специальную реализацию в PMLP/ParSol метода для мелкоблочного формата матриц BColsCSR), и с агрегативным AMG при возрастании временного шага. AgAMG со встроенными в него сглаживателями SGS_{bcst} и $\text{DILU}_{\text{bcst}}$ (как в реализации ЛОГОС. Аэрогидродинамика) не обгонял блочный $\text{ILDU}_{\text{bcst}}$, однако, в нем имеется возможность использования в качестве сглаживателей любых последовательных (или многопоточных) предобусловливателей библиотеки PMLP/ParSol, в частности, $\text{ILDU}_{\text{bcst}}$. На рис. 3 показано число итераций при увеличении шага до 20 суток при использовании в задаче блочного $\text{ILDU}_{\text{bcst}}$ и AgAMG со сглаживателем $\text{ILDU}_{\text{bcst}}$. Задаче требуется всего 15 шагов на период добычи 100 дней, причем с шагом 20 суток выполнено только 2 шага из 15, так как задача повышает шаг до 20 суток постепенно, начиная с одних суток.

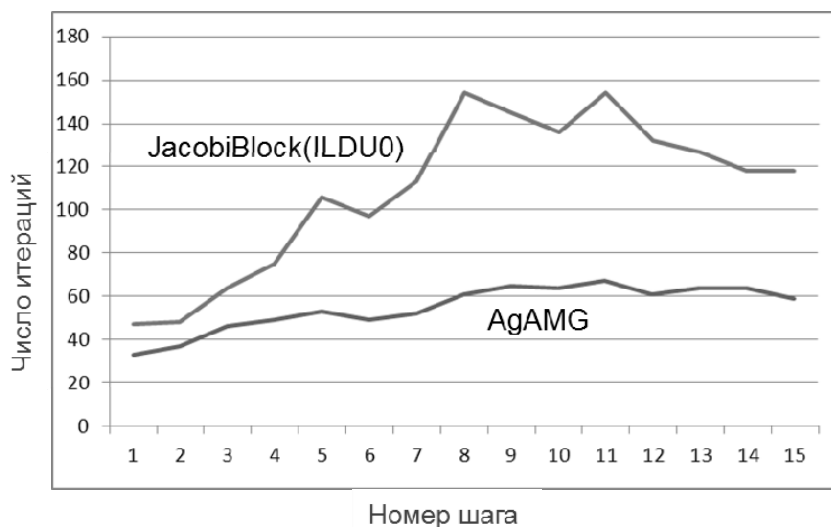


Рис. 3. Решение мелкоблочных СЛАУ комплекса НИМФА

Видно, что число итераций BiCGStab с агрегативным AMG по мере роста временного шага возрастает слабее, чем с блочным $\text{ILDU}_{\text{bcst}}$. Отсюда и выигрыш по времени на этой серии СЛАУ, отраженный в табл. 9.

Таблица 9

Время решения мелкоблочных СЛАУ комплекса НИМФА

BiCGStab с предобусловливателем	Время решения, с.
AgAMG ($s = \text{ILDU}_0\text{-bcsr}$)	11,6
JacobiBlock ($\text{ILDU}_0\text{-bcsr}$)	12,6
BoomerAMG и AMG	∞

Здесь так же стоит отметить, что предобусловливатели AMG и BoomerAMG не поддерживают счет с мелкоблочными матрицами.

На трех характерных СЛАУ, выработанных в той же задаче на этапах счета с шагом 1, 5 и 20 суток, был испытан составной CPR-предобусловливатель с многосеточным методом для компоненты давления. В нем сначала многосеточным методом находится вектор поправки для компоненты давления, а затем с его участием блочным методом ILDU_0 находится вектор поправки для всех трех неизвестных.

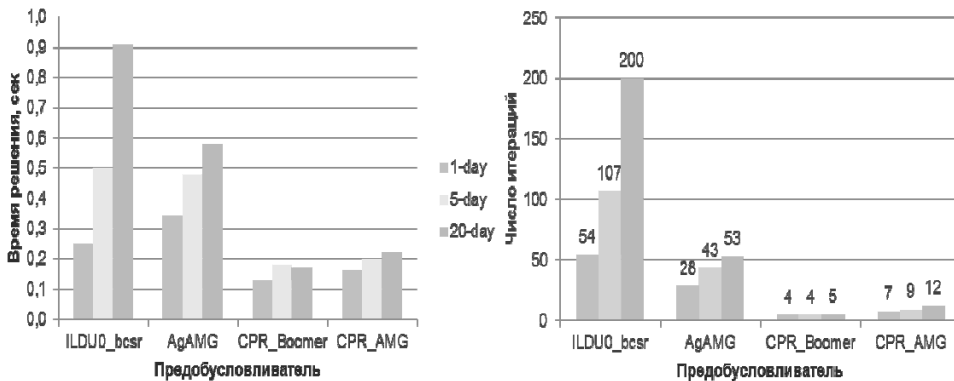


Рис. 4. Разное предобусловливание трех мелкоблочных СЛАУ комплекса НИМФА

Варианты CPR-AMG и CPR-BoomerAMG, как видно на рис. 4, решили СЛАУ ещё быстрее, чем блочный $\text{ILDU}_0\text{-bcsr}$. Даже для временного шага 1 сутки они решили СЛАУ быстрее и, в отличие от AgAMG с $\text{ILDU}_0\text{-bcsr}$ и блочного $\text{ILDU}_0\text{-bcsr}$, гораздо слабее среагировали на увеличение временного шага. В двух других задачах наименьшее время решения СЛАУ показал вариант CPR-ILUt. В нем для нахождения поправки компоненты давления вместо AMG используется $\text{ILUt}(0.001)$ с отбросом значений коэффициентов A_{ij} вырабатываемых фактор-матриц по правилу $|A_{ij}| < 0,001 \times |A_{ii}|$.

Следующие две задачи – из области атомной энергетики из модуля ЛОГОС. Тепло. На одной из них AMG оказался лучше, на другой – лучше блочный ILU_0 (табл. 10 и 11).

Таблица 10

Задача № 1, ~ 9,8 млн ячеек, 72 MPI, SPD-матрица СЛАУ

Решатель	Предобусловливатель	Среднее число итераций	Время Решения, с
CG	AMG ($\varepsilon = 0,025, s = \text{Jac}$)	26 – 29	12,5
CG	AMG ($\varepsilon = 0,1, s = \text{Jac}$)	41 – 45	25,6
CG	Schwarz (IC2($\tau = 0,01, \dots$))	332 – 348	49,2
CG	JacobiBlock (ILU_0)	884 – 954	71,3

Таблица 11

Задача № 2, ~ 0,86 млн ячеек, 24 MPI, SPD-матрица СЛАУ

Решатель	Предобусловливатель	Среднее число итераций	Время решения, с
CG	JacobiBlock (ILU ₀)	36 – 46	1,13
CG	AMG ($\varepsilon = 0,025$, $s = \text{Jac}$)	11 – 12	2,32

Можно здесь отметить большую долю времени на построение пирамиды матриц AMG в сравнении с построением блочного ILU₀. Сокращение времени решения с помощью AMG составило несколько раз, но есть примеры, где AMG сокращает время ещё сильнее. В задачах ЛОГОС. Тепло так же есть смысл испытать адаптивное предобусловливание, чем сейчас мы и занимаемся.

Заключение

Проведенные эксперименты позволяют сделать следующие выводы:

1. Многосеточные методы работают на разнообразных сетках.
2. Время решения СЛАУ при использовании постоянной структуры матриц пирамиды AMG можно значительно сократить, но с учетом интенсивности изменения моделируемого процесса;
3. Многосеточные методы часто предобусловливают СЛАУ лучше, чем ILU, и конкурируют с ним.

Как видно, существуют ситуации, когда многосеточные медленнее, поэтому мы предлагаем их использовать в адаптивной схеме предобусловливания совместно с ILU, а также дальше улучшать и расширять набор имеющихся многосеточных предобусловливателей.

В заключение отметим направления развития PMLP/ParSol. Нам следует продвигаться далее, используя опыт ряда российских коллективов по этому направлению. Так, в отделе Жукова В. Т. ИПМ РАН разработан AMG с адаптивным полиномом Чебышева [18]. В ООО ТЕСИС Силаевым Д. П. разработаны 2 варианта решателя AMG – агрегативный и селективный – последний путем переработки ряда методов из BoomerAMG для распоточивания вычислений с помощью ТВВ с использованием их с автоматической подстройкой под задачу [19]. В свою очередь мы начали улучшать селективный AMG, реализуя некоторые методы огрубления, интерполяции, неявного и явного сглаживания, хорошо зарекомендовавшие себя в BoomerAMG на наших задачах. Также представляет интерес реализация не только явных сглаживателей, но и явных предобусловливателей. Здесь хорошую основу дают работы Капорина И. Е. и Милуковой О. Ю. с хорошими результатами на плохообусловленных матрицах прочности [20], чем можно было бы воспользоваться для решения задач по ЛОГОС. Прочность. Так же представляет интерес реализация специальных форматов для диагональных и близких к ним матрицам, также предобусловливание с одинарной точностью.

Литература

1. Лашкин С. В., Силаев Д. П., Симонов П. Г. и др. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. – 2013. – Вып. 4. – С. 44 – 56.
2. Henson V. E., Yang U. M. BoomerAMG: a Parallel Algebraic Multigrid Solver and Preconditioner // Applied Numerical Mathematics. – 2002. – 41. – 55 – 177.
3. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский и др. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на супер-ЭВМ: базовые технологии и алгоритмы // XIII Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. тез. – Саров, 2011. – С. 53 – 54.
4. Алейников А. Ю., Бардина М. Н., Горев В. В. и др. Параллельная версия комплекса программ НИМФА // XIII Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. тез. – Саров, 2011. – С. 26 – 27.

5. Бартенев Ю. Г., Бондаренко Ю. А., Ерзунов В. А. и др. Комплекс LParSol для решения СЛАУ // XIII Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. тез. – Саров, 2011. – С. 34 – 36.
6. Liebmann M. Algebraic Multigrid Methods on GPU-Accelerated Hybrid Architectures. – Institute for Mathematics and Scientific Computing, University of Graz, 2011.
7. Чеботарь С. В., Сухих А. С. Параллельный решатель систем линейных алгебраических уравнений «модуль NEWT». Его применение в методике КОРОНА // XVI Всероссийская конференция-школа молодых исследователей «Современные проблемы математического моделирования» 14 – 19 сентября 2015 г. пос. Абрау-Дюрсо.
8. Лашкин С. В., Силаев Д. П., Симонов П. Г. и др. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. – 2013. – Вып. 4. – С. 44 – 56.
9. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Карпов А. П., Кузнецов В. Ю., Петров Д. А., Резчиков В. Ю., Стаканов А. Н., Щаникова Е. Б. Применение параллельных решателей СЛАУ в пакетах программ инженерного анализа РФЯЦ-ВНИИЭФ // XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. науч. тр. / под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2017. – С. 28 – 36.
10. Капорин И. Е., Милюкова О. Ю. Предобусловливание итерационных методов для эффективного массивно-параллельного решения систем алгебраических линейных уравнений // XIII Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. тез. – Саров, 2011. – С. 71 – 72.
11. Вишняков А. Ю., Дерюгин Ю. Н., Глазунов В. А., Чистякова И. Н. Пакет программ ЛОГОС. Модуль расчета сопряженных и связанных задач теплопереноса // XIV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. науч. тр. / под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2013. – С. 154 – 161.
12. Кузнецов В. Ю., Бутнев О. И., Горев И. В. и др. Полностью неявная схема решения задач трёхфазной фильтрации на неструктурированных сетках в пакете программ НИМФА // XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. науч. тр. / под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2017. – С. 183 – 196.
13. Горбунов А. А. Метод решения уравнения теплопроводности на нерегулярных сетках в параллельном режиме в методике МЕДУЗА // Вопросы атомной науки и техники. Серия: математическое моделирование физических процессов. – 2008. – Вып. 3. – С. 32 – 46.
14. Дерюгин Ю. Н., Полищук С. Н., Тихомиров Б. П. Расчет лучистой теплопроводности в методике МРС с использованием неточных методов Ньютона // XV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. науч. тр. / под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2015. – С. 198 – 205.
15. Софронов И. Д., Винокуров О. А., Змушко В. В., Плетенев Ф. А., Сараев В. А. Комплекс программ МИМОЗА // Вопросы математического моделирования, вычислительной математики, информатики. – М. – Арзамас-16, 1994. – С. 94 – 96.
16. Smith V. F., Vjorstad P. E., Gropp W. D. Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations. Cambridge University Press, 2004.
17. Klaus Stüden, SPE et al. Algebraic Multigrid Methods (AMG) for the Efficient Solution of Fully Implicit Formulations in Reservoir Simulation // SPE Reservoir Simulation Symposium papers, 2007.
18. Жуков В. Т., Краснов М. М., Новикова Н. Д., Феодоритова О. Б. Алгебраический многосеточный метод с адаптивными сглаживателями на основе многочленов Чебышева: Препринт № 113. – М.: ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016.
19. Силаев Д. П., Харченко С. А., Ющенко А. А. Параллельная реализация алгебраического многосеточного метода с адаптивным выбором алгоритма огрубления для решения разреженных СЛАУ в программном комплексе FlowVision // XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. науч. тр. / под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2017. – С. 109 – 110.
20. Капорин И. Е., Милюкова О. Ю. MPI + OpenMP параллельная реализация метода сопряженных градиентов с некоторыми явными предобусловливателями: Препринт № 8. – М.: ИПМ им. М. В. Келдыша, 2018.

SLAE SOLUTION IN PROGRAM PACKAGES OF THE INSTITUTE OF THEORETICAL AND MATHEMATICAL PHYSICS USING ALGEBRAIC MULTIGRID METHODS

A. P. Karpov, Yu. G. Bartenev, V. A. Erzunov, D. A. Petrov, A. N. Stakanov, E. B. Shchanikova

Russian Federal Nuclear Center –
All-Russian Research Institute of Experimental Physics, Sarov

The paper describes the results of testing and comparison of several parallel preconditioning algebraic multi-grid methods and block ILU when solving the problems using LOGOS Heat module, NIMFA software package and some other methods in VNIIEF that comprise the solution of the heat transfer equation using implicit methods on regular and irregular meshes. We showed a possibility to speed up the computations of the problems when implementing selective AMG and aggregative AMG (AgAMG) of PMLP/ParSol library and BoomerAMG of hypre- library with seldom restructuring of coarse matrices when solving SLAE -flow at the sections of computations that produce complex SLAE, and that reduces considerably the costs of AMG construction. In a number of cases a faster solution of SLAE in a parallel multi-flow mode is ensured by incomplete ILU-factorization of local matrices of the problem processes which is broadened with one-sided overlapping and matching of corrections by I.E. Kaporin method. Both methods show their advantages in other cases of solutions as well. So, here there is a problem-dependent choice of the fastest method, which is solved partly either by the combination of both methods during preconditioning of each of SLAE with two-stage CPR -method, or by setting a number of parameters of preconditioning including both types of AMG- and ILU-preconditioning that are automatically selected in the course of computations aiming at time minimization of SLAE solution.

Key words: sparse matrices, a system of linear algebraic equations SLAE, computational systems with distributed memory and shared memory, preconditioning methods: parallel algebraic multi-grid ILU-decomposition (Schwarz), Coarse Grid Correction, CPR, adaptive preconditioning.

УДК 621.039.56; 519.65; 519.245

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЙ КУСОЧНО-ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ ДЛЯ АНАЛИЗА НЕЙТРОННОГО ШУМА В РЕАКТОРЕ ИБР-2М

Н. В. Корепанова^{1,2}, Н. Д. Дикусар¹, Ю. Н. Пепельшев¹, М. Дима³

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

²Институт современной физики, Китайская академия наук, Ланьчжоу, Китай

³Национальный научно-исследовательский институт физики и ядерной технологии им. Хулубея, Магуреле, Румыния

В нормальных условиях работы реактора полный размах шумов ИБР-2М относительно среднего уровня мощности достигает $\pm 22\%$. Поэтому медленные изменения средней мощности, так называемые базисные компоненты мощности, обусловленные, например, перемещением органов