

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951505309_2022_27_1_190

Многократное использование многоуровневой структуры данных в алгебраическом многосеточном решателе СЛАУ

Ю. Г. Бартенев, А. П. Карпов

Рассмотрен способ многократного использования построенной многоуровневой структуры данных алгебраического многосеточного предобусловливателя и решателя для потока СЛАУ с одинаковым портретом матриц. Этот способ, названный частичным построением алгебраического многосеточного решателя вслед за его полным построением для предшествующей СЛАУ, состоит в обновлении только значений коэффициентов ранее построенных грубых матриц без изменения их структуры. Представлены примеры применения сочетания полного и частичного построения алгебраического многосеточного решателя в различных вариантах его реализации. Показано значительное сокращение времени решения СЛАУ в задачах моделирования различных физических процессов с использованием указанного способа построения решателя в библиотеке PMLP/ParSol и некоторых других библиотеках. Вкратце затрагивается вопрос адаптивного сочетания полного и частичного построения алгебраического многосеточного решателя.

Введение

Алгебраические многосеточные решатели и предобусловливатели AMG (Algebraic Multi-Grid) [1, 2] используются при решении СЛАУ с разреженными матрицами при счете различных задач с использованием неявных численных методов на параллельных ЭВМ. Стадия построения AMG, заключающаяся в иерархическом построении грубых матриц и векторов правой части все уменьшающегося размера, часто занимает больше времени, чем стадия итерационного решения СЛАУ в случае небольшого числа итераций. Для сокращения полного времени решения СЛАУ с использованием AMG (построение + решение) предлагается эмпирически проверенный способ частичного построения AMG. Он заключается в фиксации структуры всех ранее построенных грубых матриц AMG для нескольких подряд идущих СЛАУ с одинаково разреженными матрицами и обновлении только значений коэффициентов этих матриц. Это достигается путем фиксации всех построенных для текущей СЛАУ матриц рестрикции R и пролонгации $P = R^T$ для части последующих СЛАУ до тех пор, пока затраты на возможное увеличение числа итераций из-за неточности построения не превзойдут снижения затрат из-за частичного построения AMG.

Накладные расходы этого способа могут состоять в повышенном расходе памяти. Матрицы R и P или только одну из них, а также грубые матрицы приходится хранить в памяти до момента вызова решателя следующей СЛАУ. Медленная сходимость решения следующей СЛАУ из-за частичного (менее точного) построения AMG может быть условием полного построения AMG для следующей СЛАУ.

Частичное построение реализовано в агрегативном (AgAMG) и селективных многосеточных предобусловливателях библиотеки PMLP/ParSol [3] параллельных решателей СЛАУ и проверялось в задачах моделирования процессов лучистой теплопроводности, фильтрации жидкости в пористых среда, течения жидкости и газа, распространения тепла в твердом теле. Оно также вводилось и проверялось в AMG библиотеки Parallel Toolbox [4], BoomerAMG библиотеки hypre [5], решателе AgAMG модуля аэродинамики комплекса ЛОГОС [6]. Часть полученных результатов без описания рассматриваемого здесь способа опубликована в работах [3, 7]. Частичное построение AMG, как и другие способы частичного построения предобусловливателей, такие как переиспользование перекрытий матриц, векторов перестановки, грубой матрицы двухсеточного варианта Шварца (Coarse Grid Correction), были применены в адаптивном предобусловливателе потока СЛАУ с одним портретом матриц [8, 9].

Описание способа и модель применения

Пусть программа моделирования некоторого физического процесса порождает последовательность (поток) СЛАУ с одной неизвестной в каждой ячейке сетки. При этом неизвестное в данной ячейке во всей последовательности СЛАУ зависит от одного и того же набора неизвестных. Например, такой неизменный состав взаимозависимых неизвестных свойственен счету на сетке постоянного размера и топологии. В этом случае СЛАУ данного потока обладают матрицами, отличающимися только коэффициентами в одних и тех же позициях (матрицы с одинаковым портретом). Существуют приложения, где топология и размер сетки постоянны на протяжении либо решения всей задачи, либо нескольких временных шагов, либо одного временного шага на итерациях по нелинейности. Поэтому матрицы множества СЛАУ, соответствующие таким этапам счета, обладают постоянным портретом. В этом случае некоторые операции решателя СЛАУ, например, указанные в конце Введения, могут быть выполнены для первой СЛАУ и применяться для всех СЛАУ этого потока. К таким операциям можно отнести и частичное построение пирамиды предобусловливающих матриц AMG, которое, в отличие от обычного (полного) построения AMG, пренебрегает изменением силы связи неизвестных на каждом уровне иерархии при решении нескольких СЛАУ и использует зависимость мелких и грубых неизвестных, определенную алгоритмом AMG для первой СЛАУ такого потока. Таким образом, операция $A_c = P^T A_f P$, A_f – подробная матрица, а матрица пролонгации P постоянна для каждого уровня грубых матриц нескольких подряд идущих СЛАУ, порождает грубые матрицы A_c с одинаковым портретом и разными значениями на одинаковых уровнях.

Частичное построение AMG, при котором не строятся матрицы пролонгации¹, а используются ранее построенные, позволяет значительно сократить время построения грубых матриц нескольких следующих СЛАУ. Например, при решении в параллельном режиме трех СЛАУ нелинейного процесса теплопроводности методики MPC [10] методом AgAMG(smooth=Jacoby, agg=4) + BiCGStab² [3, 6, 11], где полное построение AgAMG выполнялось для первой СЛАУ, а частич-

¹ Построение матриц пролонгации – процесс выбора грубых неизвестных (или агрегатов неизвестных) путем обхода коэффициентов, избивающий операциями сравнения и условного перехода, которые являются источниками низкой производительности этого процесса.

² Здесь параллельный многопоточный алгебраический многосеточный предобусловливатель агрегативного типа, подобный решателю, описанному в работе [6], используется в сочетании с итерационным решателем BiCGStab. В скобках указаны параметры: сглаживатель Якоби и агрегирование по 4 ячейки.

ное – для двух следующих, на построение AgAMG затрачено 0,73 с вместо 174 с при полном построении AMG для каждой СЛАУ. При этом в обоих случаях на итерации затрачено 98 с.

Частичное построение AMG в отдельных случаях может совпадать с полным. Например, на итерациях по нелинейности в ряде случаев используется метод, приводящий к коррекции только диагонали матрицы СЛАУ. Такая коррекция не вносит изменений в метод разделения неизвестных на грубые и мелкие, который основан на отношении силы связи неизвестного j с неизвестным i к силе связи максимально связанного с i неизвестного k [5]:

$$-A_{ij} > -stA_{ik},$$

где $-A_{ik} = \max_j \{-A_{ij}, j \neq i\}$, $0 \leq st < 1, 0$, $A_{ij} < 0$ и $A_{ik} < 0$. Игнорирование силы связи (параметр $st = 0$) имеет такой же результат.

В других случаях построенные матрицы пролонгации следующей СЛАУ на каждом уровне обычно отличаются от матриц пролонгации предыдущей СЛАУ из-за изменения взаимозависимости неизвестных. Поэтому *пролонгация матриц пролонгации* с текущей СЛАУ на следующую может изменить качество предобусловливания (число итераций), но, как правило, не сильно, как наблюдалось в экспериментах [8]. Частичное построение AMG должно контролироваться, чтобы экономия времени построения AMG не привела к значительному росту числа итераций и увеличению времени решения СЛАУ. Этот контроль может быть вынесен за пределы AMG и отнесен к выбору наилучшего предобусловливателя потока СЛАУ, среди которых, помимо данного AMG, могут быть другие его разновидности, блочные ILU и др. В библиотеке PMLP/ParSol это выполняется в методе адаптивного выбора предобусловливателя потока СЛАУ [9].

Число СЛАУ потока с постоянной структурой разреженности матриц, допускающих эффективное использование одной и той же пирамиды грубых матриц AMG на разных участках счета, различно, даже если размер и топология сетки не изменяются. Например, в задаче [8], удовлетворяющей вышеуказанным условиям, рассчитываемой по методике МИМОЗА [12], частичное построение AMG эффективно применялось для решения потока СЛАУ на одном, нескольких, сотнях временных шагов после полного построения AMG ранее решенной СЛАУ.

Способ частичного построения AMG изначально был предложен для решения СЛАУ давления на графическом сопроцессоре (GPGPU). Использовался предобусловливатель AMG решателя CG библиотеки Parallel Toolbox, итерации CG выполнялись на GPGPU, а достаточно длительные операции построения AMG – на универсальном процессоре, что снижало эффективность применения GPU. Основой для нового подхода служила нестрогая определенность влияния одних неизвестных на другие, за которую отвечает внедиагональный коэффициент матрицы (который известен) и значение неизвестного при этом коэффициенте (которое неизвестно). Развитие физического процесса может медленно менять влияние переменных друг на друга, видимо, тем медленнее, чем грубее уровень для нахождения все более низкочастотной составляющей ошибки решения. Поэтому можно было предположить, что один раз определенное влияние переменных друг на друга на грубых уровнях можно использовать для решения нескольких СЛАУ, порождаемых в ходе расчета. Это должно было значительно сократить время построения AMG, возможно, при небольшом изменении числа итераций.

Данное предположение подтвердилось при решении задачи стационарного течения несжимаемой жидкости в пакете программ ЛОГОС [13, 14]. Задача решалась с использованием AMG Parallel Toolbox с параметром $\varepsilon = 0$, при котором все ячейки j , инцидентные ячейке i , одинаково влияют на i , а затем $\varepsilon > 0$, при котором ячейка j влияет на ячейку i , только если $-A_{ij}/A_{ii} > \varepsilon$. Хотя при $\varepsilon = 0$ значения коэффициентов пирамиды грубых матриц A последовательности СЛАУ давления различались, их структура, а также значения пирамиды матриц пролонгации P и рестрикции R совпадали. Поэтому первым шагом по оптимизации процесса построения AMG стала реализа-

ция однократного построения пирамиды матриц пролонгации и рестрикции и многократное их применение на всех СЛАУ потока, что потребовало небольшого перепрограммирования AMG. Это несколько сократило время построения AMG, которое и так относительно невелико при построении на центральном процессоре (ЦП) в последовательном режиме.

Дополнительным шагом было использование одинаковой структуры разреженности построенной пирамиды грубых матриц коэффициентов (а не только P и R) для ускорения оператора Галеркина $A_c = RA_f P$ при частичном построении AMG. Приведенный далее алгоритм относится только к одному уровню построения AMG, для остальных уровней он выполняется аналогично.

Для текущей СЛАУ используются массивы j -индексов $jind$ и позиций первых ненулевых элементов строки pos (матрицы значений хранятся в формате CSR – Compressed Sparse Rows) грубой матрицы AMG, построенной для предыдущей СЛАУ. Матрица рестрикции R хранится в формате CSR, матрица интерполяции P – в формате CSC (Compressed Sparse Columns). В действительности же используется только матрица P : так как $P = R^T$, то, чтобы получить строку матрицы R , можно взять столбец матрицы P .

Пусть $srows$ – количество строк (и столбцов) грубой матрицы коэффициентов A_c следующего уровня AMG (оно, как и число ненулевых коэффициентов, известно от предыдущего построения AMG), $RArow$ – плотная строка для хранения результата умножения строки матрицы R (она же – столбец матрицы P) на матрицу коэффициентов A_f , изначально заполняемая нулями. Тогда алгоритм эффективного умножения трех матриц при известном положении коэффициентов в матрице A_c записывается следующим образом:

```

for i = 0...srows
do
    {Вычисление RArow для i-той строки матрицы R}
    for j = posP[i]... posP[i+1]
    do
        for k = posAf[jindP[j]]... posAf[jindP[j]+1]
        do
            RArow[jindAf[k]] += valP[j] * valAf[k]
        enddo
    enddo

    {Вычисление i-той строки матрицы Ac}
    for j = posAc[i]... posAc[i+1]
    do
        valAc[j] = 0
        for k = posP[jinds[j]]... posP[jinds[j]+1]
        do
            valAc[j] += valP[k] * RArow[jindP[k]]
        enddo
    enddo

    {Зануление только ненулевых элементов RArow}
    for j = posP[i]... posP[i+1]
    do
        for k = posAc[jindP[j]]... posAc[jindP[j]+1]
        do
            RArow = 0
        enddo
    enddo
enddo

```

Отметим, что в алгоритме отсутствуют ветвления, что также может позитивно сказаться на его выполнении.

Рассмотренный способ частичного построения AMG проверялся в задачах, где решались СЛАУ с одним неизвестным в каждой ячейке сетки (или частице в методе SPH)³ и несколькими неизвестными (три, пять) при одном ведущем неизвестном⁴. При его использовании время решения СЛАУ методом AgAMG или AMG/AgAMG + CG/BiCGStab сокращалось, что свидетельствует о довольно широком диапазоне действия предложенного способа.

Примеры применения частичного построения AMG

Приведем примеры решения потока СЛАУ с использованием частичного построения AMG после решения первой СЛАУ в задаче гидродинамики на неподвижной неструктурированной сетке.

В табл. 1, 2 представлены результаты решения потока СЛАУ при расчете течения в рубашке охлаждения двигателя в задаче с условным названием «ГБЦ КАМАЗ». Результаты получены в пакете программ ЛОГОС с использованием решателя CG с оптимизированным AMG на гибридной рабочей станции. Построение AMG выполнялось на ЦП, а решение СЛАУ – на GPGPU. Параметры AMG: сглаживатель Якоби; $\epsilon = 0$. Параметры CG: точность решения $rtol = 10^{-8}$ по критерию $\|b - Ax\| < rtol \cdot \|b\|$, где b – вектор правой части, x – вектор решения. Параметры разреженной матрицы СЛАУ: 2758929 строк, 14340611 коэффициентов. Использовались полное построение AMG для первой СЛАУ давления и частичное построение AMG для остальных СЛАУ давления.

Таблица 1

Результаты решения потока СЛАУ в задаче «ГБЦ КАМАЗ» с $\epsilon = 0$ на ЦП + GPGPU

Шаг задачи	Полное построение AMG		Частичное построение AMG		Частичное построение AMG с эффективным RAP	
	число итераций	общее время, с	число итераций	общее время, с	число итераций	общее время
1	127	9,39	–	–	–	–
2	219	11,65	219	10,21	219	7,06
5	220	11,63	220	10,21	220	7,07
51	166	10,31	166	8,98	166	5,90
55	175	10,54	175	9,16	175	6,06
251	179	10,65	179	9,40	179	6,21
255	168	10,40	168	9,08	168	5,91
451	204	11,25	204	9,80	204	6,74
455	209	11,39	209	10,44	209	6,83

³ Для задач гидродинамики несжимаемой жидкости, диффузии жидкости в пористых средах, диффузии тепла в твердом теле, лучистой теплопроводности.

⁴ В задачах аэродинамики, диффузии многофазной жидкости в пористых средах.

Таблица 2

Время (в секундах) построения AMG второй СЛАУ в задаче «ГБЦ КАМАЗ с $\varepsilon = 0$ на ЦП

Полное построение AMG	Частичное построение AMG	Частичное построение AMG с эффективным RAP
5,78	4,59	1,77

В результате оптимизации процесса построения предобусловливателя AMG в библиотеке Parallel Toolbox удалось сократить время построения более чем в 3 раза. Одновременно с этим доля времени построения AMG для СЛАУ в общем времени решения задачи «ГБЦ КАМАЗ» – заметно сократилась с ~53 до ~16 %, а количество итераций на каждом конкретном шаге не изменилось.

В табл. 3, 4 приведены данные по решению потока СЛАУ в задаче «ГБЦ КАМАЗ», полученные с использованием оптимальных (в ходе тестирования) параметров AMG: $\varepsilon = 0,05$ и сглаживателя Якоби на GPGPU.

Таблица 3

Результаты решения потока СЛАУ в задаче «ГБЦ КАМАЗ» с $\varepsilon = 0,05$ на ЦП + GPGPU

Шаг задачи	Полное построение AMG		Частичное построение AMG с эффективным RAP	
	число итераций	общее время, с	число итераций	общее время, с
1	52	8,65	–	–
2	55	8,64	83	4,51
5	47	9,56	84	4,51
51	51	9,29	67	4,1
55	44	9,5	69	4,09
251	45	9,3	67	4,09
255	36	7,99	69	4,16
451	43	8,71	75	4,28
455	42	9,11	84	4,52

Таблица 4

Время (в секундах) построения AMG второй СЛАУ в задаче «ГБЦ КАМАЗ» с $\varepsilon = 0,05$ на ЦП

Полное построение AMG	Частичное построение AMG с эффективным RAP
6,66	1,98

При сравнении времени построения предобусловливателя AMG с оптимальным $\varepsilon = 0,05$ и параметром по умолчанию $\varepsilon = 0$ видно, что в первом случае время построения больше. В случае $\varepsilon = 0$ огрубление сетки при построении сильнее и строится меньше уровней. В этом случае на огрубление не влияет сила связи. При $\varepsilon > 0$ сетка огрубляется слабее, уровней строится больше, время построения предобусловливателя увеличивается, и дополнительно увеличивается число итераций при частичном построении AMG⁵. Однако положительным итогом такого построения

⁵ При $\varepsilon > 0$, когда учитывается сила связей между неизвестными, структура грубых матриц текущей СЛАУ обычно не совпадает со структурой грубых матриц первой СЛАУ. Поэтому частичное построение

является более эффективное, чем с $\varepsilon = 0$, предобусловливание. Решение последовательности СЛАУ с частичным построением AMG с оптимальным параметром $\varepsilon = 0,05$ быстрее в 1,5 раза по сравнению с частичным построением AMG с $\varepsilon = 0$ и в 2,1 раза по сравнению с полным построением AMG с $\varepsilon = 0,05$.

Отметим, что показанная выше эффективность последовательного решения СЛАУ при частичном построении AMG в многопоточном режиме только усиливается из-за более сильного параллелизма по сравнению со слабым параллелизмом полного построения AMG. Следует также заметить, что еще более неточное построение AMG для потока СЛАУ с изменяющимися коэффициентами матриц, при котором не только не изменяются позиции коэффициентов грубых матриц, но и сами коэффициенты, дает отрицательный результат.

Далее приводятся примеры решения СЛАУ в различных задачах с разновидностями AMG в параллельном (распределенном) и многопоточном режимах на универсальных процессорах с использованием частичного построения. В данном случае алгоритм частичного построения имеет особенности в реализации оператора Галеркина при знании позиций ненулевых коэффициентов грубой матрицы и несколько отличается от описанного выше эффективного алгоритма, которому присущи повышенные затраты памяти.

В 2014 г. в пакете программ ЛОГОС «Аэрогидромеханика» [13] было выполнено *распоточивание* его параллельного кода с реализацией частичного построения AgAMG⁶. Эффективность применения частичного построения AgAMG была проведена при решении СЛАУ в стационарных модельных задачах аэродинамики с использованием нерасщепленной схемы, порождающей мелкоблочные матрицы СЛАУ (блоки 5×5) для нахождения пяти неизвестных в каждой ячейке трехмерной сетки.

На рис. 1 показан график времени решения ста СЛАУ тестовой задачи AV13⁷ на гибридном узле кластера ООО «ЦКО» [15], содержащем сервер с двумя восьмиядерными ЦП Intel Xeon (модель Sandy Bridge) и сопроцессор Intel Xeon Phi (модель KNC). Задача считалась на неструктурированной сетке, состоящей примерно из 214 тыс. ячеек, содержащих по 5 неизвестных в каждой ячейке. AgAMG агрегировал по 4 ячейки, выполнял 3 итерации постсглаживания многопоточным многоцветным симметричным сглаживателем Гаусса – Зейделя (SGS) на каждом уровне. Пунктирные линии на рис. 1 относятся ко времени решения всех ста СЛАУ задачи с полным построением AgAMG, сплошные линии – ко времени решения с полным построением AgAMG только для первой СЛАУ и частичным построением AgAMG для остальных (2–100) СЛАУ. Суммарное количество итераций AgAMG на этой задаче в обоих случаях одинаково. Число используемых нитей на оси X указано в виде произведения числа процессов на число нитей в каждом процессе.

Как видно, применение частичного построения AMG дало положительный результат, особенно заметный на сопроцессоре, менее эффективно обрабатывающем операции ветвления программы, характерные для полного построения AMG. Аналогичные результаты были получены и на задаче C20⁸ (~731 тыс. ячеек) [3].

AMG, использующее матрицы интерполяции с первого шага, как менее точное, чем полное построение AMG, увеличивает число итераций.

⁶ Однопоточный AgAMG для мелкоблочных матриц СЛАУ реализован Д. П. Силаевым, но не опубликован.

⁷ В данной задаче выполняется расчет стационарных аэродинамических характеристик механизированного сечения крыла, которое содержит 4 элемента (профиль NASA с двухзвенным закрылком и предкрылком).

⁸ Расчет аэродинамических характеристик экспериментальной ступени компрессора с использованием технологии Ротор-Статор.

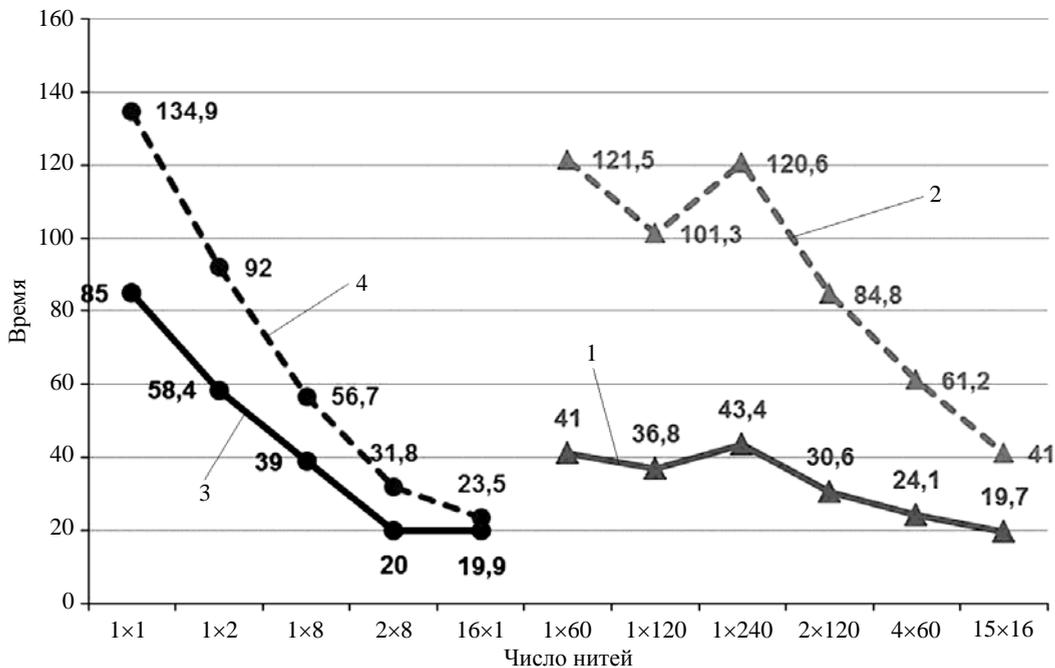


Рис. 1. Время решения ста СЛАУ задачи AV13: 1, 2 – сопроцессор; 3, 4 – ЦП

Нельзя гарантировать, что частичное построение AgAMG будет позитивно действовать на всю оставшуюся часть порождаемого потока СЛАУ. Поэтому для решения более сложных задач целесообразна тривиальная адаптивная схема использования частичного построения, а именно для каждой k -й СЛАУ выполнение полного построения AMG, а для следующих $k - 1$ СЛАУ – частичного построения.

На рис. 2 показаны графики масштабируемости полного и частичного построения решателя AgAMG в отдельности, а также суммарно с итерационной частью. Проверялись два типа поразному распоточенных сглаживателя DILU [16]: многоцветный mcDILU (на уровнях малого размера) и комбинированный adDILU (на уровнях большого размера). Как видно, масштабируемость полного построения AgAMG на ускорителе невысокая. На ЦП на масштабируемость всего решателя в большей мере оказывает влияние итерационный процесс, нежели построение пирамиды сеток. Применение адаптивного режима частичного построения (контроль за сходимостью, полное построение AgAMG на двух СЛАУ и, если число итераций не изменилось, то решение следующих восьми СЛАУ с частичным построением) повысило надежность и масштабируемость решателя AgAMG.

Ряд экспериментов с частичным и полным построением AMG библиотеки PMLP/ParSol был проведен в модуле «ЛОГОС Тепло» [17] при моделировании процесса распространения тепла в твердом теле. В ряде задач такого типа (но не во всех) AMG и AgAMG с CG или BiCGStab обеспечивают наискорейшее решение СЛАУ. Табл. 5 отражает преимущество решения СЛАУ размером $1,5 \cdot 10^6$ двенадцатью процессами с частичным построением AMG.

В комплексе программ НИМФА для решения СЛАУ задач фильтрации жидкости в пористых средах [18] предобусловливатель AMG в сочетании с решателем CG из библиотеки PMLP/ParSol использовался для решения СЛАУ в задачах однофазной фильтрации, а также решения СЛАУ давления в полунейвной схеме IMPES многофазной фильтрации. Это позволяет решать СЛАУ быстрее, чем другими методами. В настоящее время первая СЛАУ решается методом

AMG + CG с полным построением AMG, а следующие – с частичным построением AMG до тех пор, пока число итераций при решении очередной СЛАУ не превысит определенного уровня, после чего со следующей СЛАУ повторяется данный цикл. Полное построение AMG в процессе решения задачи выполняется редко – иногда всего один раз, в то время как число порождаемых СЛАУ значительно, что косвенно свидетельствует об эффективности применения частичного построения AMG в комплексе программ НИМФА.

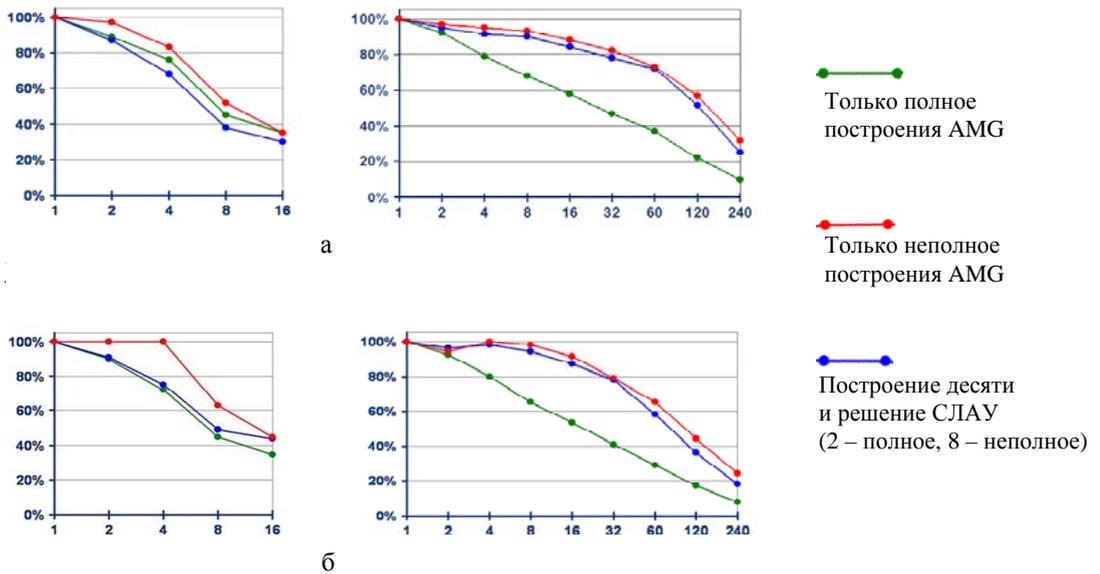


Рис. 2. Эффективность решения потока СЛАУ с использованием решателя AgAMG: а – сглаживатель mcDILU, б – сглаживатель addDILU, слева – ЦП, справа – сопроцессор

Таблица 5

Результаты решения СЛАУ диффузии тепла с использованием решателя BiCGStab с полным и частичным построением AMG

Параметры	Время решения СЛАУ, с (% в задаче)	Число решенных СЛАУ	Число итераций общее/среднее/максимальное
AMG ($\varepsilon = 0$, всегда полное построение)	151,3(87,6)	38	1140/30/35
AMG ($\varepsilon = 0$, одно полное построение)	139,9(89,0)	38	1145/30/36
BlockJacobi (ILU0)	464,1(97,8)	38	13101/345/381

В работах [8, 9] отражена эффективность применения частичного построения AMG и BoomerAMG в сочетании с решателем BiCGStab с адаптивным предобусловливателем потока СЛАУ процесса лучистой теплопроводности при решении трех задач с постоянной топологией сетки по методике МИМОЗА [12]. С частичным построением AMG СЛАУ решались быстрее, чем блочным методом Шварца с ILU_t внутри блоков.

Наконец, покажем преимущество применения частичного построения AMG при решении СЛАУ нелинейного процесса лучистой теплопроводности методом частиц в ячейках на часто изменяющейся дробной сетке в методике МРС. В табл. 6 отражено время решения 24 СЛАУ на че-

тырех шагах трудоемного участка счета с использованием 30 многопоточных MPI-процессов, где с точностью 10^{-8} первая на шаге СЛАУ решается с полным построением AMG⁹, а остальные – с частичным. Указаны наилучшие значения параметров. Как видно, на оба селективных AMG решение двадцати СЛАУ с частичным построением оказало положительное влияние, что значительно ускорило решение всех СЛАУ даже в случае заметного возрастания числа итераций при использовании наиболее точного сглаживания полиномом Чебышева (Cheby), применимого для SPD-матриц. При этом был получен наилучший по времени и числу итераций результат.

Таблица 6

Решение 24 СЛАУ с использованием решателя CG с AMG и с блочным IC0

Предобусловливатель	Число полных построений	Общее число итераций (min-max)	Время, с		
			построения	итераций	суммарное
BlockJacobi (Schw_omp(IC0))	24	4369(1-522)	4,24	28,72	32,96
AMG ($\epsilon = 0,0125$, Jacobi)	24	337(1-42)	39,27	11,09	50,36
AMG2 (SGS)	24	944(1-161)	20,28	30,30	50,58
AMG2 (Cheby)	24	104(1-10)	22,94	3,92	26,85
BlockJacobi (Schw_omp(IC0))	4	4369(1-522)	1,51	29,53	31,04
AMG ($\epsilon = 0,0125$, Jacobi)	4	377(1-42)	15,41	12,51	27,92
AMG2 (SGS)	4	964(1-161)	6,23	29,31	35,54
AMG2 (Cheby)	4	200(1-30)	8,74	7,51	16,24

Для сравнения в табл. 7 приведены результаты решения СЛАУ с использованием методики MPC с точностью 10^{-8} на менее трудоемком участке счета задачи. Здесь у предобусловливателя AMG2 небольшое преимущество по сравнению с блочным Якоби, причем только в режиме частичного построения. Расходы на полное построение значительны, примерно как показано в табл. 6. Предобусловливателю AMG здесь не хватило 600 итераций, хотя СЛАУ не очень сложные. Это объясняется тем, что при заданном параметре $\epsilon = 0,0125$, по которому оценивается сила связи неизвестных, AMG в данном случае не строит даже первой грубой матрицы, так как ее число строк слабо сокращается по сравнению с исходной матрицей. В AMG библиотеки PMLP/ParSol предусмотрена «самозащита» от изредка возникающих подобных ситуаций, например, завершение построения грубых матриц переходом на $\epsilon = 0$.

Таблица 7

Решение 20 СЛАУ с использованием решателя CG с AMG и блочным IC0

Предобусловливатель	Число полных построений	Общее число итераций (min-max)	Время, с		
			построения	итераций	суммарное
BlockJacobi (Schw_omp(IC0))	20	606(1-215)	5,618	7,054	12,671
AMG ($\epsilon = 0,0125$, Jacobi)	20	нет решения			
BlockJacobi (Schw_omp(IC0))	4	783(1-215)	2,487	9,683	12,170
AMG2 (SGS)	4	255(1-55)	4,142	8,474	12,616
AMG2 (Cheby)	4	62(1-12)	7,803	3,036	10,839

⁹ В методике MPC сетка перестраивается довольно часто, поэтому в ней применяется ограниченное поддержание режима частичного построения AMG – до первой СЛАУ следующего шага. В задачах с постоянной топологией сетки режим частичного построения AMG эффективно работает дольше.

Заключение

В работе показана возможность ускорить решение потока СЛАУ за счет частичного, более быстрого построения AMG для текущей СЛАУ, опираясь на переиспользование данных предшествующего затратного полного построения с необходимой адаптацией к скорости сходимости.

В качестве дополнительного усовершенствования AMG-предобусловливателей библиотеки PMLP/ParSol представляет интерес реализация адаптивного сглаживания, развитого в работах ИПМ им. М. В. Келдыша РАН [19].

Авторы признательны Е. Б. Щаниковой, В. А. Ерзунову, Д. А. Петрову за участие в реализации и проверке различных вариантов AMG PMLP/ParSol, а также М. Л. Сидорову за консультации по использованию решателей в пакете НИМФА.

Список литературы

1. Федоренко Р. П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Журнал вычислит. математики и матем. физики. 1961. Т. 1, № 5. С. 922–927.
2. Ruge J. W., Stuben K. Algebraic multigrid // *Frontiers in Appl. Mathematics. Multigrid methods* / Ed. by S. F. McCormick. – Philadelphia, Pennsylvania: SIAM, 1987. P. 73–130.
3. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Ерзунов В. А. и др. Применение параллельных решателей СЛАУ в пакетах программ инженерного анализа РФЯЦ-ВНИИЭФ // Тр. XVI Межд. конф. «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2017. С. 28–36.
4. Liebmann M. Algebraic multigrid methods on GPU-accelerated hybrid architectures. – Graz: Institute for Mathematics and Scientific Computing of University, 2011.
5. Henson V. E., Yang U. M. BoomerAMG: a parallel algebraic multigrid solver and preconditioner // *Appl. Numerical Mathematics*. 2002. Vol. 41. P. 155–177.
6. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Лашкин С. В. 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. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2013. Вып. 4. С. 44–56.
7. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Карпов А. П. и др. Параллельные решатели СЛАУ в пакетах программ РФЯЦ-ВНИИЭФ // Вестник ПНИПУ. Аэрокосмическая техника. 2016. Вып. 47. С. 73–92.
8. Карпов А. П., Бартнев Ю. Г., Ерзунов В. А. и др. Решение СЛАУ алгебраическими многосеточными методами в приложениях ИТМФ // Тр. XVII Межд. конф. «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2019.
9. Ерзунов В. А., Бартнев Ю. Г. Программа адаптивного выбора метода решения потока СЛАУ в библиотеке PMLP/PARSOL // Там же.
10. Дерюгин Ю. Н., Полищук С. Н., Тихомиров Б. П. Расчет лучистой теплопроводности в методике МРС с использованием неточных методов Ньютона // Тр. XV Межд. конф. «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015. С. 198–205.

11. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. 2nd edition. – N.Y.: PWS Publish., 2000.
12. Софронов И. Д., Винокуров О. А., Змушко В. В. и др. Комплекс программ МИМОЗА-99 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1999. Вып. 4. С. 37–41.
13. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К. и др. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС: физико-математические модели расчета задач аэро-гидродинамики и тепломассопереноса : препринт № 111-2-13. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013.
14. Бартенев Ю. Г., Карпов А. П., Крючков И. А. и др. Адаптация некоторых решателей СЛАУ для арифметических ускорителей NVIDIA // Тез. докл. XIV Межд. конф. «Супервычисления и математическое моделирование». – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 30–32.
15. Официальный сайт ООО «ЦКО» [Электронный ресурс]. – <https://compcenter.org/>.
16. Eisenstat S. C. Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods // SIAM J. Sci. Comput. 1981. Vol. 2, N 1. P. 1–4.
17. Вишняков А. Ю., Дерюгин Ю. Н., Глазунов В. А., Чистякова И. Н. Пакет программ ЛОГОС. Модуль расчета сопряженных и связанных задач теплопереноса // Тр. XIV Межд. конф. «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013. С. 154–161.
18. Пронин В. А., Бутнев О. И., Горев И. В. и др. Комплекс программ НИМФА. Методика решения нелинейной однофазной фильтрации жидкости и тепломассопереноса в пористых средах // Тр. XVI Межд. конф. «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2017. С. 252–260.
19. Жуков В. Т., Краснов М. М., Новикова Н. Д., Феодоритова О. Б. Алгебраический многосеточный метод с адаптивными сглаживателями на основе многочленов Чебышева : препринт № 113. – ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016 [doi: 10.20948/prepr-2016-113].

Repeated use of a Hierarchical Data Structure in an Algebraic Multigrid Solver for Systems of Linear Algebraic Equations

Yu. G. Bartenev, A. P. Karpov

Repeated use of a hierarchical data structure generated in an algebraic multigrid preconditioner and solver for a series of SLAEs with the same matrix profile is considered. This approach, called partial construction of a multigrid algebraic solver fully pre-constructed for a previous SLAE, involves updating merely the coefficients of the pre-constructed coarse matrices without changing their structure. Examples of using a combination of full and partial construction of an algebraic multigrid solver in different modifications of its implementation are given. This solver construction approach in the PMLP/ParSol and some other libraries is shown to considerably reduce the time of solving SLAEs in simulations of different physical processes. The issue of adaptive combination of full and partial algebraic multigrid solver construction is discussed in brief.