

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ РЕШАТЕЛЬ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ «МОДУЛЬ *NEWT*». ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ В МЕТОДИКЕ КОРОНА

Чеботарь С.В., Сухих А.С.

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г.Саров Нижегородской обл.

Принципы построения модуля Newt.

- Использование машин с распределенной памятью. Стандарт передачи сообщений MPI;
- Реализация небольшого числа методов для использования на максимально широком классе задач без перенастройки;
- Дружественный и максимально простой интерфейс.

В процессе разработки:

- Использование средств программирования на общей памяти;
- Использование графических ускорителей;
- Использование векторных устройств процессоров и сопроцессоров.

Интерфейс модуля Newt

- Минимальный необходимый набор процедур для решения отдельной системы или последовательности систем с одинаковыми или близкими матрицами;

В качестве аргументов только объекты предметной области:

- ✓ Матрица,
- ✓ Элементы матрицы - их значения и индексы,
- ✓ Векторы правой части и решения.

- Интерфейсы для языков Fortran и C, C++.

структурные объекты – переменные производных типов языка Fortran 90

✓ Вместо производных типов языка Фортран - целочисленные переменные «хэндлы» в качестве аргументов,
✓ Векторы дополняются своими размерами.

✓ Задание три-коммуникатора матрицы,
✓ Сшивка локальных подматриц в глобальную распределенную матрицу.

- Параллельный интерфейс отличается от последовательного наличием двух дополнительных процедур

индексация матричных элементов на процессоре привязывается к локальной индексации пользовательских массивов, содержащих элементы векторы правой части и векторы решения (к сеточной нумерации)

Интерфейс модуля Newt.

- Запрос справочной информации и выдача логов решения.

Вывод кода возврата, таймирования процедур решателя, а также информации о ходе решения: число итераций,

- Возможности настройки на метод решения данной задачи.

Метод по умолчанию позволяет эффективно решать определенный класс задач.

Указание свойств матрицы. Например, указание симметрии матрицы -> сохранение только верхней треугольной части, разложение Холесского и использование рCG.

Имеется возможность явно задать метод и его параметры.

- Задание типа и параметров критерия точности.

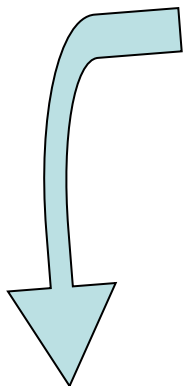
Выбор одного из трех критериев точности.

- Набор базовых операций, например умножение матрицы на вектор и т.д.

С помощью специальных процедур можно получить, например, вектор невязки или вектор переменных, в которых не удалось обеспечить заданную точность решения и т.д.

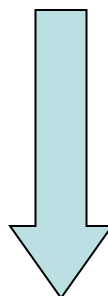
Основа модуля Newt

Параллельное многоуровневое неполное LU-разложение



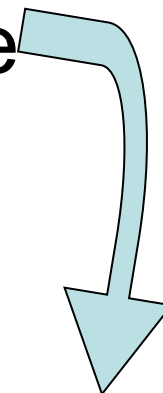
Параллельное неполное LU-разложение в сочетании с неполным блочным разложением обратной матрицы.

Перенос тепла, диффузия излучения, и т.д.



Метод для решения пучков систем уравнений с узкими профильными матрицами.

Методики, использующие алгоритм расщепления по направлениям.



Алгебраический многоуровневый метод.

Стационарные и почти стационарные задачи, например, из нефтегазовой области.

Неполное LU-разложение разреженных матриц в сочетании с неполным блочным разложением обратной матрицы

- Разделение переменных на граничные и внутренние.
- ILUt – разложение блока A_{II} ;
- Вычисление приближенного дополнения Шура.

$$A = \begin{pmatrix} A_{II} & A_{IB} \\ A_{BI} & A_{BB} \end{pmatrix}$$

$$A_{II} \approx L_{II} U_{II}$$

$$S = A_{BB} - A_{BI} A_{II}^{-1} A_{IB} \approx A_{BB} - A_{BI} (L_{II} U_{II})^{-1} A_{IB}$$

Полностью
параллельно

Каждый столбец матрицы S распределен по нескольким процессорам

Перераспределение строк матрицы S между процессорами.

Построение неполного блочного разложения обратной матрицы, предложенного И.Капориним.
 ✓ S разбивается на подматрицы с перекрытием «вверх».
 ✓ В областях строится $ILUt$.

$$S_p \approx L_s U_s, p = 1, \dots, mpi_size$$

$$S^{-1} \approx \sum_{p=1}^{mpi_size} U_s^{-1} \begin{pmatrix} 0_{1,q} & 0 \\ 0 & I_{q+1, dim_p+q} \end{pmatrix} L_s^{-1}$$

mpi_size – число процессоров,
 q – величина перекрытия «вверх»,
 dim_p – число строк матрицы S на процессоре.

Метод для решения пучков систем уравнений с узкими профильными матрицами

- Разделение переменных каждой отдельной матрицы на граничные и внутренние.
- LU – разложение блока A_{II} каждой матрицы.
- Вычисление дополнения Шура.

$$A = \begin{pmatrix} A_{II} & A_{IB} \\ A_{BI} & A_{BB} \end{pmatrix}$$

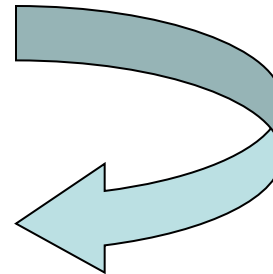
$$A_{II} = L_{II} U_{II}$$

$$S = A_{BB} - A_{BI} A_{II}^{-1} A_{IB} = A_{BB} - A_{BI} (L_{II} U_{II})^{-1} A_{IB}$$

Полностью
параллельно

- Матрицы S каждой системы распределены по процессорам.
- Каждый процессор хранит часть матрицы S каждой системы.

- Перераспределение частей матриц S каждой системы.



- Данные, относящиеся к каждой системе, частично или полностью собираются на одном из процессоров.
- Группы систем распределяются на разные наборы процессоров.

- Уменьшается количество систем на каждом процессоре.
- Количество участвующих в счете процессоров не уменьшается (пока на каждом из процессоров имеется часть хотя бы одной системы).



Краткое описание методики КОРОНА

- расчетная сетка лагранжево-эйлерова (радиальное направление – подвижная лагранжева сетка, угловые направления неподвижная эйлерова сетка) ,
- неявная разностная схема,
- граница между веществами по углу отслеживается с помощью составных ячеек,

✓ если количество веществ в ячейке сетки больше 1, то она разбивается на компоненты;
✓ каждая компонента отвечает одному веществу со своими параметрами: температура, плотность, урс и т.д.;
✓ решение уравнений газодинамики и теплопроводности такое же как и для чистой ячейки.

- переменный по размеру разностный шаблон,

размер шаблона зависит от количества компонент в ячейках и от степени неортогональности расчетной сетки.

- в случае сложной геометрии задача делится на фрагменты.

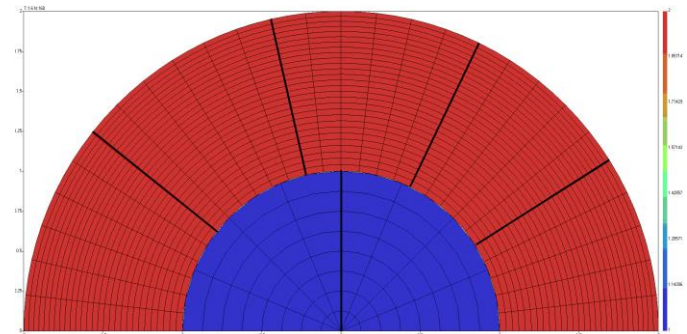
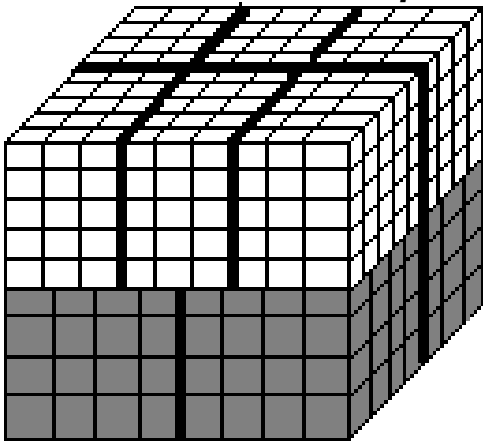
построение расчетной сетки и декомпозиция на процессоры в каждом фрагменте осуществляется по своим правилам.

Краткое описание методики КОРОНА

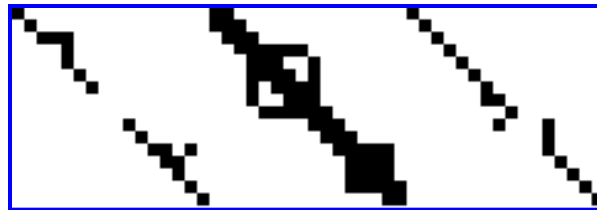
- Разбиение фрагментов на процессоры осуществляется по угловым направлениям.

двумерный счет – одномерная декомпозиция фрагмента,
трехмерный счет – двумерная декомпозиция

два фрагмента, трехмерный расчет,
10 процессоров.



два фрагмента, двумерный расчет,
7 процессоров.



Фрагмент портрета матрицы из
блока теплопроводности
двумерного расчета.

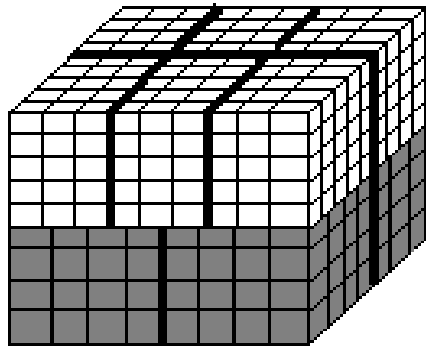
Краткое описание методики КОРОНА

- Решение уравнений газовой динамики методом расщепления по направлениям.
- При решении по каждому направлению системы группируются по независимым линейкам процессоров.

Каждая строка и столбец сетки определяют независимую систему уравнений.



Если имеются составные ячейки то система с узким профилем, иначе – трехдиагональная.



*Две группы систем- в первой 25 , во второй 20.
Каждый набор систем распределен на своей линейке из 3-х процессоров.*

*Две группы систем- в первой 16 , во второй 12.
Каждый набор систем распределен на своей линейке из 2-х процессоров.*

Направление счета

- Решение уравнения теплопроводности по полностью неявной схеме, одновременно во всех направлениях по всей геометрии задачи.
- Итерирование по нелинейности.
- Изменение портрета матрицы от шага к шагу.

Пересчет матрицы с сохранением портрета.

Численные эксперименты в программе теплопроводности

Задача.	Число проц.	MLILU-BILU		Блочный Якоби		Отношение времен блочного Якоби и MLILU-BILU	Эффективность по отношению к одному процессору	Эффективность по отношению к минимальному числу процессоров > 1
		число итераций	Общее время	число итераций	Общее время			
korona 5	1	14	0.32	14	0.32			
dim = 105067	12	16	0.04	42	0.077	1.9	67%	
nnz = 687271	24	16	0.025	57	0.056	2.2	53%	80%
	48	17	0.018	70	0.07	3.9	37%	56%
korona 6	1	5	4	5	4			
dim = 1794874	40	6	0.17	18	0.26	1.5	59%	
nnz=10462727	80	8	0.09	37	0.24	2.7	56%	94%
korona 7	1	27	3.7	27	3.7			
dim = 508002	24	52	0.36	199	1	2.8	43%	
nnz=3548308	72	46	0.23	284	0.5	2.2	22%	52%
korona 8	1	4	2.1	4	2.1			
dim = 690870	32	15	0.17	210	1.1	6.5	39%	
nnz=4573477	64	16	0.1	228	0.57	5.7	33%	85%
korona 9	1	16	4.7	16	4.7			
dim = 1094631	48	22	0.21	111	0.66	3.1	47%	
nnz=7604165	96	20	0.13	135	0.37	2.8	38%	81%
	192	29	0.08	170	0.24	3.0	31%	66%
korona 10	1			19	3.9			
dim=590886	24	24	0.27	72	0.46	1.7	57%	
nnz = 4179453	48	27	0.17	98	0.3	1.8	45%	79%

- Эксперименты с отдельными матрицами из 2D задач.
- Сравнение с блочным методом Якоби (BJ).
- Подбор оптимальных параметров для обоих преобусловителей.

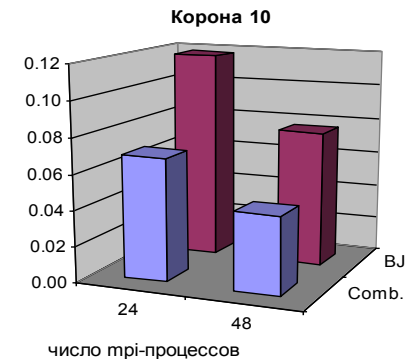
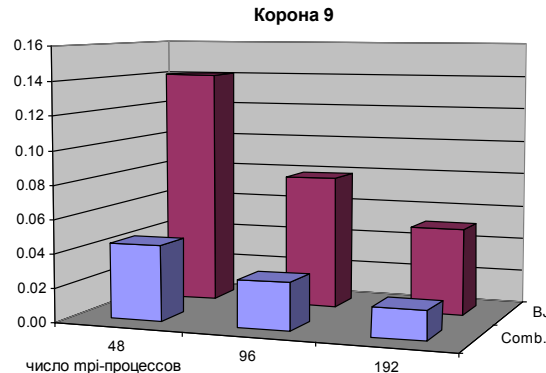
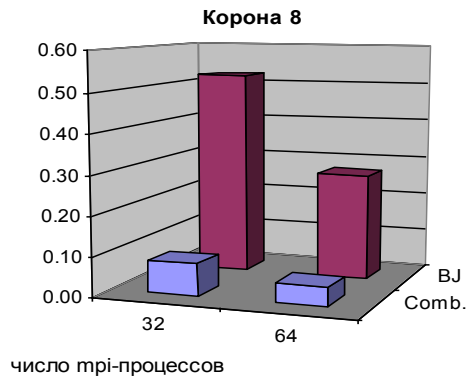
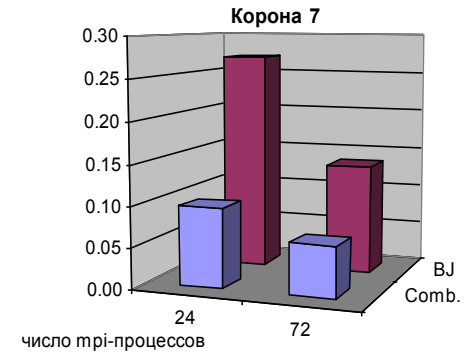
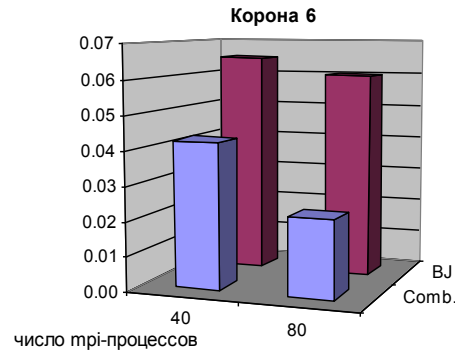
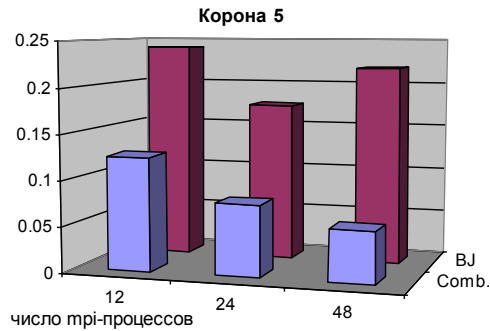
$$\mu = \max_i \frac{|f_i - \sum_j a_{ij}x_j|}{|f_i| + \sum_j |a_{ij}x_j|} \leq t, t = 10^{-9}$$

- Ускорение относительно BJ в 1.7 – 6.5 раз.
- Во время подбора методов BJ с некоторыми системами не справился. У MLILU-BILU справился не было.



Численные эксперименты в программе теплопроводности

Времена параллельного решения набора задач на разном числе процессов, отнесенные к временам решения на одном ядре.

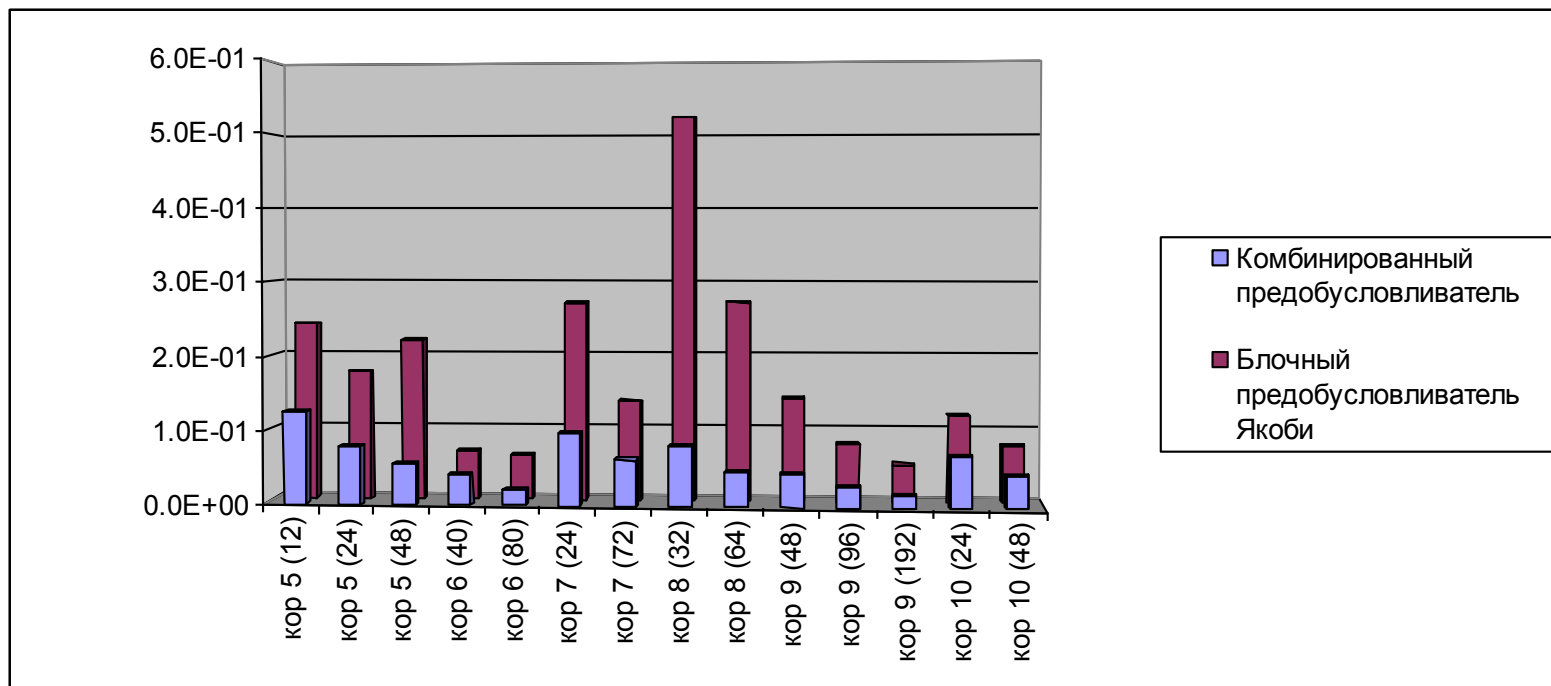


 - Комбинированный метод (Comb.)

 - Блочный метод Якоби (BJ)

Численные эксперименты в программе теплопроводности

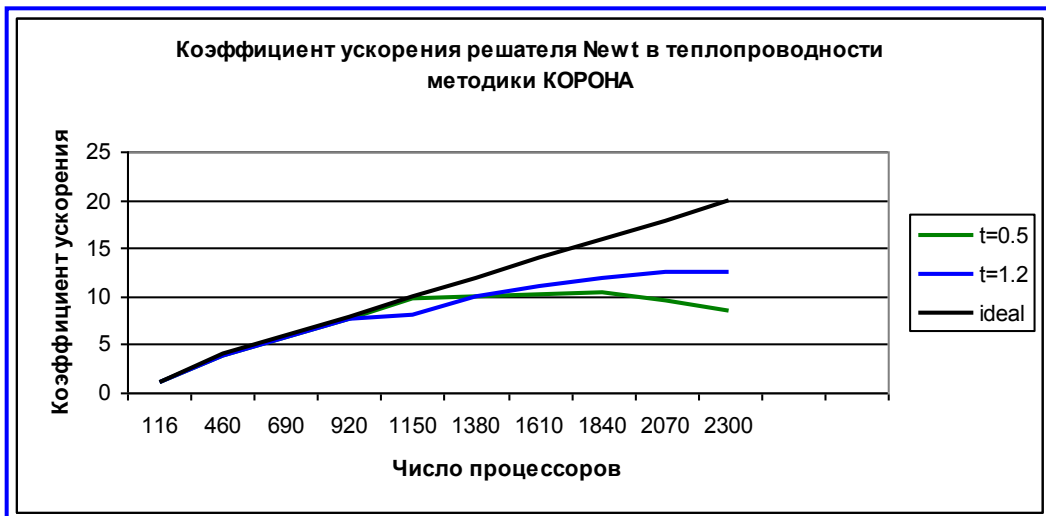
Времена параллельного решения СЛАУ, отнесенные к временам решения на одном процессоре.



Численные эксперименты в программе теплопроводности

процессоры	стартовое время t=0.5					стартовое время t=1.2				
	Число итераций	Время Newt	Все время Теплопров одн.	Козфф. ускорения Newt	Эффективн. распараллеливания Newt	Число итераций	Время Newt	Все время Теплопров одн.	Козфф. ускорения Newt	Эффективн. распараллеливания Newt
116	360	110	210			1089	251	416		
460	495	28.3	55	3.9	97%	1106	66	104	3.8	95.1%
690	564	19	38	5.8	96%	1042	43	61	5.8	97.3%
920	618	14.3	26.4	7.7	96%	1274	33	49	7.6	95.1%
1150	574	11.3	20	9.7	97%	1465	31	40	8.1	81.0%
1380	791	11	20	10.0	83%	1468	25	36.6	10.0	83.7%
1840	1025	10.6	17.5	10.4	65%	1515	21	30	12.0	74.7%
2300	1320	13	19	8.5	42%	1551	20	29	12.6	62.8%

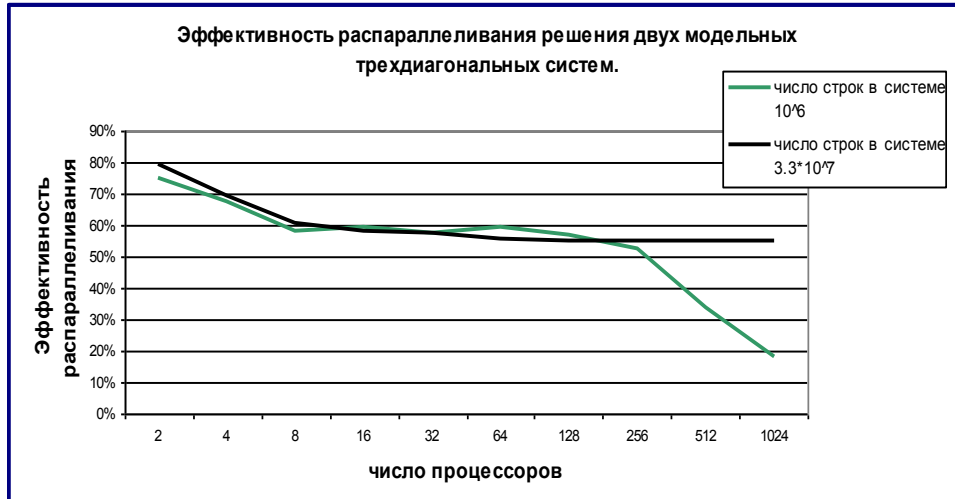
- Две серии расчетов «на дробление» одной и той же задачи в различные моменты времени.
- Порядка 18 миллионов узлов сетки.
- Задача из 5 фрагментов.



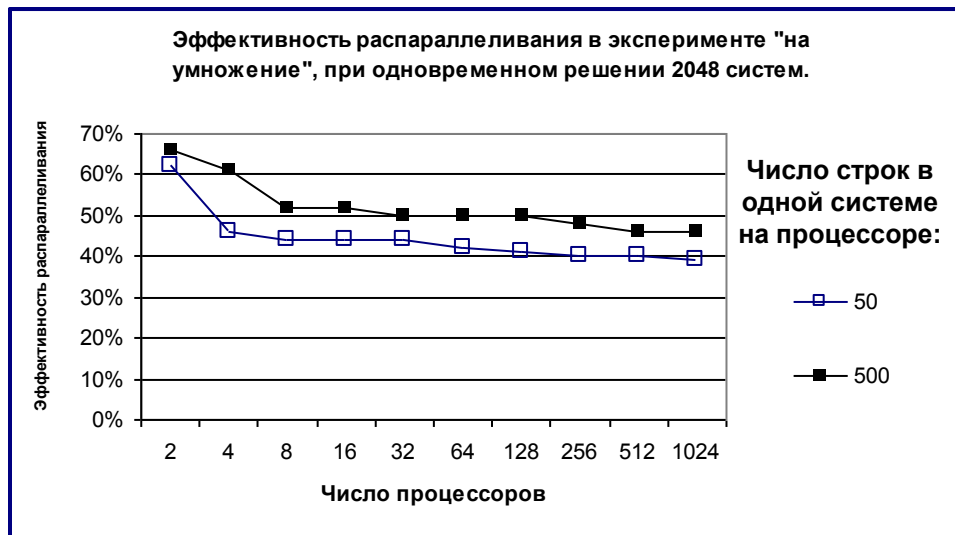
- Относительно небольшой рост числа итераций.
- Доля времени 50-70% от времени теплопроводности.
- Эффективность 65-97% до 1840 процессоров.



Численные эксперименты с модельными задачами



Два эксперимента на дробление, в каждом из которых решается по одной системе размерности 10^6 и $3.3 \cdot 10^7$.



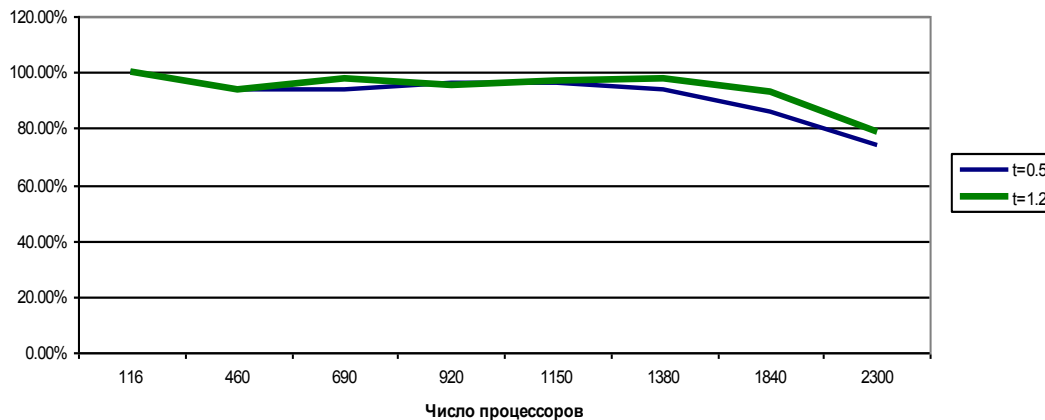
Два эксперимента «на умножение»: общее число решаемых систем 2048, локальная размерность систем не изменяется с ростом числа процессоров.

Численные эксперименты в программе газовой динамики

стартовое время t=0.5				стартовое время t=1.2				
Число проц.	Время Newt	Ускорение	Эффективность	Время Г.Д.	Время Newt	Ускорение	Эффективность	Время Г.Д.
116	19			110	25			140
460	5.1	4	94%	35	6.7	4	94%	41
690	3.4	6	94%	25	4.3	6	98%	26
920	2.5	8	96%	18	3.3	8	96%	21
1150	2	10	96%	14.6	2.6	10	97%	17
1380	1.7	11	94%	13	2.15	12	98%	15.4
1840	1.4	14	86%	10	1.7	15	93%	13
2300	1.3	15	74%	9	1.6	16	79%	11.5

- Две серии расчетов «на дробление» одной и той же задачи. в различные моменты времени.
- Порядка 18 миллионов узлов сетки.
- Задача из 5 фрагментов.

Эффективность распараллеливания решателя в блоке газовой динамики методики КОРОНА.



- Доля времени от расчета ГД менее 20%.
- Эффективность свыше 75%.



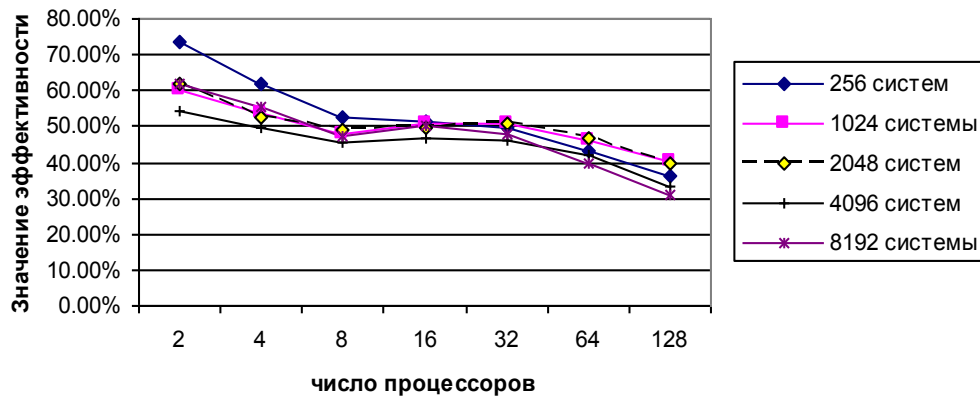
Заключение

- **Разработан решатель систем линейных алгебраических уравнений «модуль Newt». Он внедрен в программы газовой динамики и теплопроводности методики КОРОНА и используется при проведении двумерных и трехмерных расчетов в параллельном режиме.**
- **Интерфейс модуля поддерживает вызовы из программ на языках Fortran, C, C++ . Имеется три уровня настройки на метод решения.**
- **Комбинированный многоуровневый предобусловливатель в проведенных экспериментах обеспечил решение СЛАУ в блоке теплопроводности методики КОРОНА с эффективностью порядка 65-95 % до 1840 процессоров.**
- **В представленных экспериментах пучки систем линейных уравнений в блоке газовой динамики методики КОРОНА решены с эффективностью 75-98% на числе процессоров до 2300.**
- **Решатель Newt успешно используется в других методиках ИТМФ для расчета таких процессов как теплопроводность, диффузия излучения и т.д. в параллельном режиме в двумерных и трехмерных постановках.**

Спасибо за внимание!

Численные эксперименты с модельными задачами

Общая размерность каждой системы 4096. Каждая кривая соответствует своему количеству одновременно решаемых систем.



Решение задач «на дробление»
Изменяется количество решаемых систем. Общая размерность каждой системы фиксированная.

Общая размерность каждой системы 8192. Каждая кривая соответствует своему количеству одновременно решаемых систем.

