

# Библиотека параллельных алгебраических решателей Krylov

Бутюгин Д.С.<sup>1,2</sup>    Гурьева Я.Л.<sup>1</sup>    Ильин В.П.<sup>1,2</sup>  
Перевозкин Д.В.<sup>1</sup>    Петухов А.В.<sup>1</sup>    Скопин И.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт Вычислительной Математики и  
Математической Геофизики СО РАН

<sup>2</sup>Новосибирский Государственный Университет

Параллельные вычислительные технологии–2013

Библиотека высокопроизводительных итерационных решателей

$$Ax = b, \quad x, b \in \mathbb{R}^N, \quad A \in \mathbb{R}^{N,N}, \quad \det |A| \neq 0. \quad (1)$$

Текущее состояние:

- различные типы СЛАУ
- безматричные методы
- мелкоблочные СЛАУ
- алгебраические методы декомпозиции области
- одно- и двух-уровневые итерационные методы в подпространствах Крылова
- представительный набор параллельных предобуславливателей
- МВС с общей и распределенной памятью
- модульная расширяемая структура
- оптимизированные вычислительные алгоритмы
- использование сторонних высокопроизводительных библиотек

- 1 Кластерные итерационные методы
- 2 Программные технологии библиотеки Krylov
- 3 Численные эксперименты
- 4 Заключение

# Методы декомпозиции области

- 1 Одно-направленная декомпозиция графа матрицы
  - “Одномерная” декомпозиция
  - Построение блочно-трехдиагональной СЛАУ
  - Декомпозиция с пересечениями
- 2 “Многомерная” алгебраическая декомпозиция
  - Более слабые ограничения на число подобластей
  - Декомпозиция с пересечениями
- 3 Пользовательская декомпозиция
  - Задается разбиение на блочные строки (без пересечений)
  - Возможность автоматического “расширения” подобластей

Первые два метода — на корневом узле. 3-й метод — полностью распределенный.

Распределенная СЛАУ:

$$A_{p,p}u_p + \sum_{\substack{q=1 \\ q \neq p}}^P A_{p,q}u_q = f_p, \quad p = 1, \dots, P, \quad (2)$$

$$u^n = u^{n-1} + B^{-1}(f - Au^{n-1}) = u^{n-1} + B^{-1}r^n, \quad (3)$$

$$B^{-1} = B_{AS}^{-1} = \sum_{p=1}^P B_p^{-1}, \quad B_p^{-1} = W_p^T \bar{B}_p^{-1} W_p, \quad \bar{B}_p = \bar{A}_{p,p} + \theta \bar{D}_p$$

Параметр  $\theta \in [0, 1]$  определяет тип краевого условия: Дирихле ( $\theta = 0$ ), Неймана ( $\theta = 1$ ) или Робена.

В общем случае используется как приближенный предобуславливатель для метода Flexible GMRES:

$$B_n^{-1} = B_{AS,n}^{-1} + B_{c,n}^{-1} + B_{d,n}^{-1} \quad (4)$$

- допускается приближенное обращение
- $B_c^{-1}$  — грубосеточная коррекция
- $B_d^{-1}$  — дефляция

- 1 PARDISO из Intel® MKL
  - полное  $LU$ -разложение  $A_{p,p}$
  - время разложения —  $O((N/P)^3)$
- 2 Предобусловленные итерационные методы GMRES и BiCGStab
  - Предобуславливатель — USOR:

$$B = (G - L)G^{-1}(G - U) = D - L - U + LG^{-1}U$$

$$\bar{A}\bar{u} = \bar{f} \equiv (L_G - LU_G^{-1})^{-1}f, \quad \bar{u} = (U_G - L_G^{-1}U)u$$

$$\bar{A}v = (I - \bar{L})^{-1}[v + (\bar{D} - 2I)w] + w, \quad w = (I - \bar{U})^{-1}v$$

$$G = \frac{1}{\omega}D,$$

- Автоматический выбор квази-оптимального  $\omega$
- Поддержка “мелкоблочных” СЛАУ
- Полное  $LU$ -разложение диагональных блоков (в мелкоблочном варианте)

- C++ (шаблоны и статический полиморфизм)
- Модульные технологии построения решателей
- Оптимизированные матричные и векторные операции (в т.ч. из библиотек Eigen и Intel® MKL)
- $LU$ -декомпозиция для подобластей — при помощи PARDISO из Intel® MKL
- Полностью распределенный решатель
- MPI и OpenMP параллелизм
- Итерационные CUDA решатели в подобластях (CuSP)
- Асинхронные коммуникации
- Планирование вычислений по уровням и multicoloring

Тестирование проводилось на кластере НКС-30Т.



Каждый узел — Intel Xeon E5540, 2.53 ГГц, 2x4 ядер, 16 ГБ памяти.

ОС — Red Hat Enterprise Linux 5.4.

Intel Composer XE 2013 for Linux.

Intel® MPI v4.1, Intel® MKL v11.0.

Внешний решатель — распределенный Flexible GMRES.

Критерий останова итераций:

$$\|r^n\|_2 \leq \varepsilon \|f\|_2, \quad \varepsilon = 10^{-7}$$



# Решение задач гидро-газодинамики

СЛАУ с  $N = 1.73 \cdot 10^6$ ,  $N_Z = 12 \cdot 10^6$ .  $T_1 = 87.1$ ,  $N_{th} = 4$ .  
Решатель в подобластях: PARDISO.

$P \setminus \Delta$		0	1	2	3	4	5
5	$t$	60.6	39.9	33.9	30.9	28.5	27.4
	$N_t$	235	116	78	59	46	37
10	$t$	58.4	32.9	24.6	21.0	19.1	17.4
	$N_t$	486	244	167	124	99	79
20	$t$	118.5	47	28.6	22.6	18.3	16.0
	$N_t$	934	479	330	246	194	157
30	$t$	230.5	74.5	53.9	33.4	27.0	20.8
	$N_t$	1352	690	473	355	280	228

Здесь и далее:  $P$  – общее число MPI-процессов;  $\Delta$  – параметр пересечения в декомпозиции;  $N_{th}$  – количество формируемых OpenMP потоков в одном MPI-процессе;  $T_1$  – время решения СЛАУ без распараллеливания;  $N_t$  – число внешних итераций;  $t$  – общее время решателя.

# Решение задач гидро-газодинамики

СЛАУ с  $N = 9.38 \cdot 10^6$ ,  $N_Z = 50.4 \cdot 10^6$ .  $T_1 = 399.4$ ,  $N_{th} = 4$ .  
Решатель в подобластях: PARDISO.

$P \setminus \Delta$		0	1	2	3	4	5
5	$t$	280.4	199.4	153.9	146.5	140.6	143.5
	$N_t$	235	119	85	67	55	47
10	$t$	127.9	73.6	61.3	56.3	51.9	49.6
	$N_t$	311	161	116	92	76	66
20	$t$	147.4	71.2	51.9	47.0	41.3	40.6
	$N_t$	331	175	127	101	84	72
30	$t$	158.3	76.9	59.2	52.7	49.5	48.4
	$N_t$	355	186	135	109	95	80

Здесь и далее:  $P$  – общее число MPI-процессов;  $\Delta$  – параметр пересечения в декомпозиции;  $N_{th}$  – количество формируемых OpenMP потоков в одном MPI-процессе;  $T_1$  – время решения СЛАУ без распараллеливания;  $N_t$  – число внешних итераций;  $t$  – общее время решателя.

Характеристики блочных распределенных СЛАУ:

Наименование	$N \cdot 10^{-6}$	$NZ \cdot 10^{-6}$	$P$	$m$
Г5	9.5	330	48	5
Г6	3.7	126.8	36	5
Г7	6.5	44.4	20	1
Г8	0.35	1.74	20	1

- Декомпозиция — пользовательская
- Параметр перекрытия областей  $\Delta = 0$

# Прямые и итерационные решатели для внутренних СЛАУ

Используемые решатели:

- PDS — PARDISO
- BCG — BiCGStab с мелкоблочным USOR

Результаты численных экспериментов:

Метод	Г5		Г6		Г7		Г8	
	$t$	$N_t$	$t$	$N_t$	$t$	$N_t$	$t$	$N_t$
PDS, $N_{th} = 8$	58.9	38	18.9	21	121.6	351	3.8	189
PDS, $N_{th} = 2$	149.6	38	42.4	21	178.8	351	4.7	189
BCG, $n^i = 10$	49.3	39	13.6	21	498.5	368	14.6	252
BCG, $n^i = 20$	70.5	38	19.7	21	843.9	360	24.9	206







В таблицах:  $P$  – общее число MPI-процессов;  $N_{th}$  – количество формируемых OpenMP потоков в одном MPI-процессе;  $N_t$  – число внешних итераций;  $t$  – общее время решателя,  $n^i$  – ограничение числа внутренних итераций.

- Представлена концепция и численные алгоритмы библиотеки Krylov
- На рассматриваемых СЛАУ с  $m = 1$  прямой решатель PARDISO имеет существенное преимущество перед итерационными; увеличение количества используемых потоков  $N_{th}$  от 2 до 8 дает ускорение от 1.5 до 3 раз
- Прямой решатель PARDISO проигрывает “мелкоблочному” итерационному алгоритму для СЛАУ с  $m = 5$
- При использовании итерационных внутренних решателей для СЛАУ допускается приближенное решение задач в подобластях

Спасибо за внимание!

Вопросы?

## Список литературы

-  Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems, second edition // SIAM — 2003.
-  Ильин В. П. Методы и технологии конечных элементов // Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2007. — 370 с.
-  Ильин В.П., Бутюгин Д.С., Ицкович Е.А и др. Krylov: библиотека алгоритмов и программ для решения СЛАУ // Совр. пробл. матем. модел. Сб. тр. Всеросс. науч. молод. школ. – Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федерального университета, 2009. – С. 110–128.
-  Кормен Т. Алгоритмы: построение и анализ / Кормен Т., Лейзерсон Ч., Ривест Р. – М., МЦНМО: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2004.
-  Intel (R) Math Kernel Library from Intel: сайт  
URL: <http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl/>
-  Кластер НКС-30Т: сайт  
URL: <http://www2.sccc.ru/НКС-30Т/НКС-30Т.htm>