Українська Федерація Інформатики

Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України

Вищий навчальний заклад Укоопспілки
«ПОЛТАВСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ ЕКОНОМІКИ І ТОРГІВЛІ»
(ПУЕТ)

ІНФОРМАТИКА ТА СИСТЕМНІ НАУКИ (ІСН-2015)

МАТЕРІАЛИ
VI ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ ЗА МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ

(м. Полтава, 19–21 березня 2015 року)

За редакцією професора О. О. Ємця

Полтава
ПУЕТ
2015

УДК 519.6

ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАЛЕЛЬНОГО АЛГОРИТМУ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЛІНІЙНИХ СИСТЕМ ІЗ СТРІЧКОВОЮ НЕСИМЕТРИЧНОЮ МАТРИЦЕЮ

О. В. Попов*, к. ф.-м. н., с. н. с.,* ***О. В. Рудич***
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України
alex50popov@gmail.com , olgar2006@ukr.net

Розв'язування розрахункових задач, які виникають при математичному моделюванні, в переважній більшості потребує розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР). Характерним для цих задач є те, що матриці цих СЛАР в більшості випадків (див., напр., [1]) є *розрідженими* [2], тобто кількість ненульових їх елементів значно менша (не перевищує 10%) загальної кількості елементів матриці. Структура розріджених матриць визначається нумерацією невідомих.

Позначимо $m_l(i) = i - \min\{j \mid a_{ij} \neq 0\}$, $m_u(i) = \max\{j \mid a_{ij} \neq 0\} - i$, $m_l = \max_{1 \le i \le n} m_l(i)$, $m_u = \max_{1 \le i \le n} m_u(i)$. Множини значень $m_l(i)$ та $m_u(i)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, визначають профіль матриці A. Якщо ненульові елементи матриці концентруються біля головної діагоналі, тобто коли $m_l << n$ та $m_u << n$, то таку матрицю часто називають профільною. А якщо $\min_{m_l < i \le n} m_l(i)$ та $\min_{1 \le i \le n - m_u} m_u(i)$ мало відрізняються (на 5-10 %) відповідно від m_l і m_u, то таку матрицю вважають стрічковою з шириною стрічки $m_l + m_u + 1$.

Розглянемо СЛАР з дійсною квадратною невиродженою стрічковою матрицею $\boldsymbol{A}$ порядку n та матрицею правої частини $\boldsymbol{b}$ розміру $n \times q$ (або n-вимірним вектором)

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}. \tag{1}$$

Отже, розв'язування системи (1) методом Гауса полягає в розв'язуванні трьох підзадач: (і) розвинення матриці системи з частковим вибором головного елемента

$$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU} \tag{2}$$

де $\boldsymbol{L}$ – нижня трикутна матриця з одиницями на головній діагоналі, $\boldsymbol{U}$ – верхня трикутна матриця $\boldsymbol{P}$ – матриця перестановок; (ii) розв'язування СЛАР з нижньою трикутною матрицею $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$; (iii) розв'язування СЛАР з верхньою трикутною матрицею $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$.

LU-розвинення несиметричної матриці може виконуватися за формулами (для $i,j = k+1, \ldots, n$, $k = 1, 2, \ldots, n$):

$$u_{kk} = a_{kk}^{(k-1)},\ u_{kj} = a_{kj}^{(k-1)},\ m_{ik} = a_{ik}^{(k-1)} / u_{kk},\ a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - u_{kj} m_{ik}\,. \quad (3)$$

Тут m_{ij} є елементами матриці $\boldsymbol{L}$, причому у випадку виконання розвинення без вибору головного елемента $m_{ij} \equiv l_{ij}$.

Ще однією особливістю СЛАР, що виникають при розв'язуванні прикладних задач є їх високий порядок, який може перевищувати 10^7. Такі задачі, незважаючи на розрідженість матриць, потребують значних обчислювальних ресурсів (час, пам'ять тощо). Тому для їх розв'язування доцільно використовувати високопродуктивні обчислювальні системи, тобто комп'ютери з паралельною організацією обчислень. Це комп'ютери з багатьма процесорними пристроями – багатоядерними процесорами, а також співпроцесорами-прискорювачами (зокрема графічними, GPU), які набули поширення в останні роки та використовуються для виконання великих обсягів однорідних арифметичних операцій.

Як засвідчив попередній досвід авторів та проведені експериментальні дослідження найвищої ефективності паралельних обчислень при розв'язуванні задач лінійної алгебри можна досягти, використовуючи блочні циклічні алгоритми. Такі алгоритми дозволять звести більшість обчислень до матрично-матричних або матрично-векторних операцій, для виконання яких доцільно використовувати програмні модулі від виробників технічних засобів (Intel MKL BLAS, CUBLAS тощо).

Розглянемо **блочний циклічний паралельний алгоритм розвинення стрічкової несиметричної матриці**, оскільки саме ця підзадача потребує найбільшої кількості арифметичних операцій. Позначимо: $N = \lceil (n\text{-}1)/s \rceil + 1$, s – розмір блоку, $\lceil a \rceil$ – ціла частина числа a, $M_l = \lceil (m_l\text{-}1)/s \rceil + 1$, $M_u = \lceil (m_u + m_l\text{-}1)/s \rceil + 1$, $\boldsymbol{A}_K^{(K-1)}, \boldsymbol{A}_K^{(K-0,5)} = \boldsymbol{P}^{(K)} \boldsymbol{A}_K^{(K-1)}$ – праві нижні квадратні підматриці порядку n-(K-1)s, $\boldsymbol{A}_0^{(0)} \equiv \boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{P}^{(K)}$ – матриця перестановок на K-у кроці, $\boldsymbol{A}_{I,J}^{(K)}, \boldsymbol{L}_{I,J}^{(J)}, \boldsymbol{U}_{I,J}$ – в загальному випадку (крім, можливо, останніх рядка та стовпчика блоків) квадратні блоки порядку s. Тоді LU-розвинення стрічкової несиметричної матриці (3) з частковим вибором по стовпчику головного елемента можна записати в блочній формі [3]. Для $K = 1, 2, \ldots, N$:

$$\boldsymbol{L}_{K,K}^{(K)} \boldsymbol{U}_{K,K} = \boldsymbol{A}_{K,K}^{(K-0,5)}, \quad \boldsymbol{L}_{I,K}^{(K)} \boldsymbol{U}_{K,K} = \boldsymbol{A}_{I,K}^{(K-0,5)},$$
$$\boldsymbol{L}_{K,K}^{(K)} \boldsymbol{U}_{K,J} = \boldsymbol{A}_{K,J}^{(K-0,5)}, \quad \boldsymbol{A}_{I,J}^{(K)} = \boldsymbol{A}_{I,J}^{(K-0,5)} - \boldsymbol{L}_{I,K}^{(K)} \boldsymbol{U}_{K,J}. \tag{4}$$

Зауважимо, що згідно (4) на K-му кроці модифікується тільки не більше ніж $(m_l+s)\times(m_u+m_l+s)$ прямокутна підматриця. За рахунок перестановок може збільшитися порівняно з матрицею $\boldsymbol{A}$ кількість наддіагоналей верхньої трикутної матриці $\boldsymbol{U}$ – до m_u+m_l, але обчислення (4) необхідно виконувати тільки з ненульовими частинами рядків блоків цієї матриці. Це дозволяє суттєво (до 30%) зменшити час розв’язування задачі. Цей час можна також зменшити за рахунок гнучкої стратегії вибору головного елемента.

Проведені дослідження (теоретичні та експериментальні) паралельного блочно-циклічного алгоритму розв’язування СЛАР з несиметричною стрічковою матрицею засвідчили його високу ефективність на різних архітектурах паралельних комп’ютерів. Запропонований підхід можна використати для розв’язування СЛАР з матрицями інших розріджених структур.

Література

1. Хіміч О.М., Попов О.В., Полянко В.В. Проблеми паралельних і розподілених обчислень при дослідженні математичних моделей з розрідженими структурами даних. // Праці міжнародної наукової конференції “Питання оптимізації обчислень (ПОО-XL)”. – Київ: Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2013. – С.267-268.
2. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. – М.: Мир, 1984. – 334 с.
3. Попов О.В. Про паралельні алгоритми факторизації розріджених матриць. // Компьютерная математика. Сб. науч. трудов. – 2013. –Вып. 2. – С.115-124.