УДК 519.612, 519.688, 51.73

РЕАЛИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛНОГО АЛГОРИТМА МЕТОДА КРИТИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТ

Душанов Эрмухаммад Бердимуродович[1,2], Рахмонов Турдимухаммад Тухтаматович[3]

[1]Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник;
Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория радиационной биологии;
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6;
e-mail: dushanov@jinr.ru.

[2]Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник;
Институт ядерной физики АН РУ,
Лаборатория ядерной спектроскопии;
100214,г. Ташкент, пос. Улугбек, ул. Улуг Гуламов, 11;
e-mail: dushanov@jinr.ru.

[3] Кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник;
Институт ядерной физики АН РУ,
Лаборатория ядерных проблем;
100214,г. Ташкент, пос. Улугбек, ул. Улуг Гуламов, 11;
e-mail: rakhmonov@inp.uz.

В работе изложен параллельный алгоритм, созданный на основе метода критических компонент решения плохо обусловленных систем уравнений. Приведены сравнительные характеристики параллельного алгоритма с пакетом ScaLAPACK. Рассмотрены возможности применения пакета в других задачах.

Ключевые слова: трехдиагональные матрицы, параллельное программирование, машинные константы, метод критических компонент.

REALIZATION OF PARALLEL ALGORITHM OF CRITICAL COMPONENTS METHOD

Dushanov Ermuhammad[1,2], Rakhmonov Turdimuhammad[3]

[1]Candidate of Science in Physics and Mathematics, Senior scientist;
Joint Institute for Nuclear Research,
Laboratory of Radiation Biology;
141980 Dubna, Moscow reg., Dubna, Joliot-Curie str. 6;
e-mail: dushanov@jinr.ru.

[2] Candidate of Science in Physics and Mathematics, Senior scientist;
Institute of Nuclear Research Uzbek Academy of Science,
Laboratory of Nuclear Spectroscopy;
100214 pos.Ulugbek, Tashkent Ulug Gulamov str., 11;
e-mail: dushanov@jinr.ru.

[3] Candidate of Science in Physics and Mathematics, Leading scientist;
Institute of Nuclear Research Uzbek Academy of Science,
Laboratory of Nuclear Problem;
100214 pos.Ulugbek, Tashkent Ulug Gulamov str., 11;
e-mail: rakhmonov@inp.uz.

In this paper the parallel algorithm created on the basis of a critical-components method of the solving of ill-posed systems of the equations is stated. Comparative characteristics of parallel algorithm with a ScaLAPACK package are provided. Possibilities of application of a package in other tasks are considered.

Keywords: tridiagonal matrices, parallel programming, machine constants, critical-components method.

Введение

Многие задачи современной теоретической и математической физики, обработки экспериментальных данных, моделирования сложных физических явлений и установок, управления динамическими процессами [1-7] приводятся к алгебраическим уравнениям, а именно решению систем уравнений с трехдиагональными и блочно-трехдиагональными матрицами. В частности в работе [8] изучена структура ядер, смоделировано нуклон-нуклонное взаимодействие в двух- и трехтельном случаях, соответственно диагонализуемая матрица большого порядка ($\leq 10^9$) приведена в трехдиагональному виду методом Ланцоща [9]. В работе [10] результирующая матрица уравнения метода конечных элементов (Finite Element Method – FEM), основанного на уравнениях Максвелла, имеет трехдиагональный вид. Подход, развитый в работе [11], направлен на эффективное определение плотности резонансных состояний с применением стабилизирующего метода и с использованием свойств последовательности Штурма [12, 13] трехдиагональной матрицы. В работе [14] приведена одномерная ферми-модель, где основные вычислительные процедуры проводятся набором трехдиагональных матриц с фиксированными внедиагональными и переменными диагональными элементами. В работе [7] показана эффективность блочной факторизации трехдиагональных и им обратных матриц в задачах обработки экспериментальных данных в физике высоких энергий. В работе [15] рассмотрен метод для задачи стабилизации сопротивления магнитной газодинамики (magnetohydrodynamics – MHD). Основное уравнение задачи приводится к численной задаче на собственные значения с блочно-трехдиагональными матрицами.

Подобные физические задачи требуют не только тщательного изучения структуры (блочно) трехдиагональных матриц, но и умелой работы с большими порядками таких структур, контроля погрешностей при решении проблем. Поэтому практическое использование существующих пакетов программ и сравнительный анализ результатов расчетов на их основе показывают [14-16], что в случае плохой обусловленности поставленная задача разработки эффективного алгоритма еще не решена окончательно.

1. Параллельные алгоритмы метода критических компонент

Основы метода критических компонент изложены в работе [17]. В основе метода критических компонент, которым реально решаются системы:

$$C = \begin{bmatrix} q_1 & r_2 & & \\ p_2 & q_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & r_m \\ & & p_m & q_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \tag{1}$$

лежат обобщенные последовательности:

$$\Lambda_{i+1} = q_i - p_i \Lambda_i^{-1} r_i, \Lambda_2 = q_1, i = 2,3,...,m, \tag{2}$$

$$\mathrm{G}_{i-1} = q_i - r_{i+1} \mathrm{G}_i^{-1} p_{i+1}, \mathrm{G}_{m-1} = q_m, i = m-1,...,2,1, \tag{3}$$

анализ вычислительных свойств, которых имеется в [18, 19].

Численная устойчивость и высокая эффективность метода показана в применениях к реальным задачам [20, 21], и связана с точным подбором машинных констант [22].

Для того, чтобы построить параллельный алгоритм решения задачи (1) факторизуем матрицы C в виде DS факторизации следующим образом:

$$
C=\begin{bmatrix}
[C_1] &&&&&&&& \\
& 1 &&&&&&& \\
&& [C_2] &&&&&& \\
&&& 1 &&&&& \\
&&&& [C_3] &&&& \\
&&&&& 1 &&& \\
&&&&&& [C_4] && \\
&&&&&&& 1 & \\
&&&&&&&& [C_5]
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
[E] & \uparrow &&&&&&& \\
p_1 & q_1 & r_1 &&&&&& \\
& \downarrow & [E] & \uparrow &&&&& \\
&& p_2 & q_2 & r_2 &&&& \\
&&& \downarrow & [E] & \uparrow &&& \\
&&&& p_3 & q_3 & r_3 && \\
&&&&& \downarrow & [E] & \uparrow & \\
&&&&&& p_4 & q_4 & r_4 \\
&&&&&&& \downarrow & [E]
\end{bmatrix},
$$

где $\uparrow = B^k_{in}r, \downarrow = B^k_{i1}p$, E – единичная матрица, B^k_{ij} – элементы обратной матрицы к C_k, размерность которой равна на n. Матрицу S также можно факторизовать в виде $S = L\Omega R$, где

$$
L=\begin{bmatrix}
[E] &&&&&&&& \\
p_1 & 1 & r_1 &&&&&& \\
&& [E] &&&&&& \\
&& p_2 & 1 & r_2 &&&& \\
&&&& [E] &&&& \\
&&&& p_3 & 1 & r_3 && \\
&&&&&& [E] && \\
&&&&&& p_4 & 1 & r_4 \\
&&&&&&&& [E]
\end{bmatrix},
R=\begin{bmatrix}
[E] & \uparrow &&&&&&& \\
& 1 &&&&&&& \\
& \downarrow & [E] & \uparrow &&&&& \\
&&& 1 &&&&& \\
&&& \downarrow & [E] & \uparrow &&& \\
&&&&& 1 &&& \\
&&&&& \downarrow & [E] & \uparrow & \\
&&&&&&& 1 & \\
&&&&&&& \downarrow & [E]
\end{bmatrix},
$$

$$
\Omega=\begin{bmatrix}
[E] &&&&&&&& \\
& Q_1 && R_2 &&&&& \\
&& [E] &&&&&& \\
& P_2 && Q_2 && R_3 &&& \\
&&&& [E] &&&& \\
&&& P_3 && Q_3 && R_4 & \\
&&&&&& [E] && \\
&&&&& P_4 && Q_4 & \\
&&&&&&&& [E]
\end{bmatrix}
\Rightarrow
\begin{bmatrix}
Q_1 & R_2 && \\
P_2 & Q_2 & R_3 & \\
& P_3 & Q_3 & R_4 \\
&& P_4 & Q_4
\end{bmatrix}.
$$

Воспользуясь данными представлениями можно сформулировать следующий алгоритм.

Алгоритм 1 (случай хорошо обусловленности матрицы системы).

1. Найти решения хорошо обусловленной системы $C_k\bar{X}_k = Y_k$, $k = 1,2,\dots$.

2. Вычисления $Q_k = q_k - p_k B^k_{nn} r - r_k B^{k+1}_{11} p$, $R_{k+1} = -r_k B^{k+1}_{1n} r$, $P_{k+1} = -p_k B^{k+1}_{n1} p$ и элементов вектора $\hat{Y}$: $\hat{y}_k = y_k - p_k \bar{x}^k_n - r_k \bar{x}^{k+1}_1$.

3. Решение системы $\Omega\bar{X} = \hat{Y}$.

4. Решение системы $RX = \bar{X}$.

Плохая обусловленность матрицы C (1) отражается в плохой обусловленности матриц C_k и Ω. Вырожденность матриц C_k может возникнуть в двух случаях: $\Lambda_i\Lambda_{i+1} = 0$ и $\Lambda_{n+1} = 0$, в соответствующих k-блоках факторизации. В первом случае, размер матрицы C_k уменьшим сначала на одну единицу, соответственно увеличится размер матрицы Ω. Причем алгоритм вычисления решения будет иметь схожий вид с алгоритмом для хорошо обусловленной системы. Во втором случае, размер матрицы C_k увеличится на одну единицу с конца, соответственно размер матрицы Ω уменьшится.

Алгоритм вычисления во втором случае имеет следующий вид.

Алгоритм 2 (случай плохо обусловленности матрицы системы).

1. Найти решения хорошо обусловленной системы $C_k\overline{X}_k = Y_k$, $k = 1,2,\ldots$.
2. Вычисления $Q_k = q_k - p_k B_{nn}^k r - r_k B_{11}^{k+1} p$, $R_2 = -r_1 B_{1n}^2 r$, $P_4 = -p_4 B_{n1}^4 p$, $R_3 = B_{1n}^3 r$, $P_3 = B_{n1}^3 p$, $R_4 = B_{1n}^4 r$, $P_2 = B_{n1}^2 p$ и элементов вектора $\hat{Y}$: $\hat{y}_k = y_k - p_k \overline{x}_n^k - r_k \overline{x}_1^{k+1}$.
3. Решение системы $\Omega\overline{X} = \hat{Y}$.
4. Решение системы $RX = \overline{X}$.

В реальном случае, для плохо обусловленных систем, чаще всего встретится комбинированный случай всех выше перечисленных вариантов. Тогда алгоритм параллельного вычисления решения системы (1) будет иметь следующий вид.

Алгоритм 3 (случай плохо обусловленности матрицы системы).

1. Найти решения хорошо обусловленной системы $C_k\overline{X}_k = Y_k$, $k = 1,2,\ldots$.
2. Вычисления $Q_1 = q_1 - p_1 B_{nn}^1 r_1$, $Q_2 = q_2 - r_2 B_{11}^2 p$, $Q_3 = q_3 - p_3 B_{nn}^3 r - r_3 B_{11}^4 p$, $R_2 = -r_2 B_{1n}^2 r$, $P_3 = -p_3 B_{n1}^3 p$, $R_3 = -B_{1n}^3 r$, $P_2 = -B_{n1}^2 p$ и элементов вектора $\hat{Y}$: $\hat{y}_1 = y_1 - p_1 \overline{x}_n^1, \hat{y}_2 = y_2 - r_2 \overline{x}_1^2$, $\hat{y}_3 = y_3 - p_3 \overline{x}_n^3 - r_3 \overline{x}_1^4$.
3. Решение системы $\Omega\overline{X} = \hat{Y}$.
4. Решение системы $RX = \overline{X}$.

2. Результаты и обсуждения

На основе приведенных выше алгоритмов создан пакет параллельных программ, реализующий решения систем уравнений (1) общего вида. Для решения хорошо обусловленных систем $C_k\overline{X}_k = Y_k$, в отдельных процессорах, применялась подпрограмма Lin3dsysccmSolver пакета JINRLINPACK [23]. Для решения систем уравнений с индуцированной матрицей Ω применялся метод встречной прогонки. При этом отдельные элементы прогоночной последовательности формировались в отдельных процессорах и организована оптимальная передача лишь прогоночных коэффициентов. Формирования вектора решения системы $\Omega\overline{X} = \hat{Y}$ осуществлялось без передачи прогоночных элементов между процессорами.

Получены результаты вычисления решения системы (1) на четырех процессорах с различными порядками системы: N = 1 000; 10 000; 100 000; 1 000 000; 10 000 000. Время вычисления решения было сравнено с характеристиками пакета ScaLAPACK [24]. На рис. 1 приведены сравнительные характеристики времени вычислений подпрограмм Lin3dpsysccmSolver параллельного пакета JINRLINPACK и PDDTSV пакета ScaLAPACK.

Для вычисления решения системы (1) порядка 10^6 пакет Lin3dpsysccmSolver тратит 0.05 сек. времени, а пакет PDDTSV – 0.07 сек. Существенное отличие проявляется в системе порядка 10^7. Соответствующие данные отличаются примерно на 0.12 сек., что составляет примерно 1.25 раза выиграша по времени.

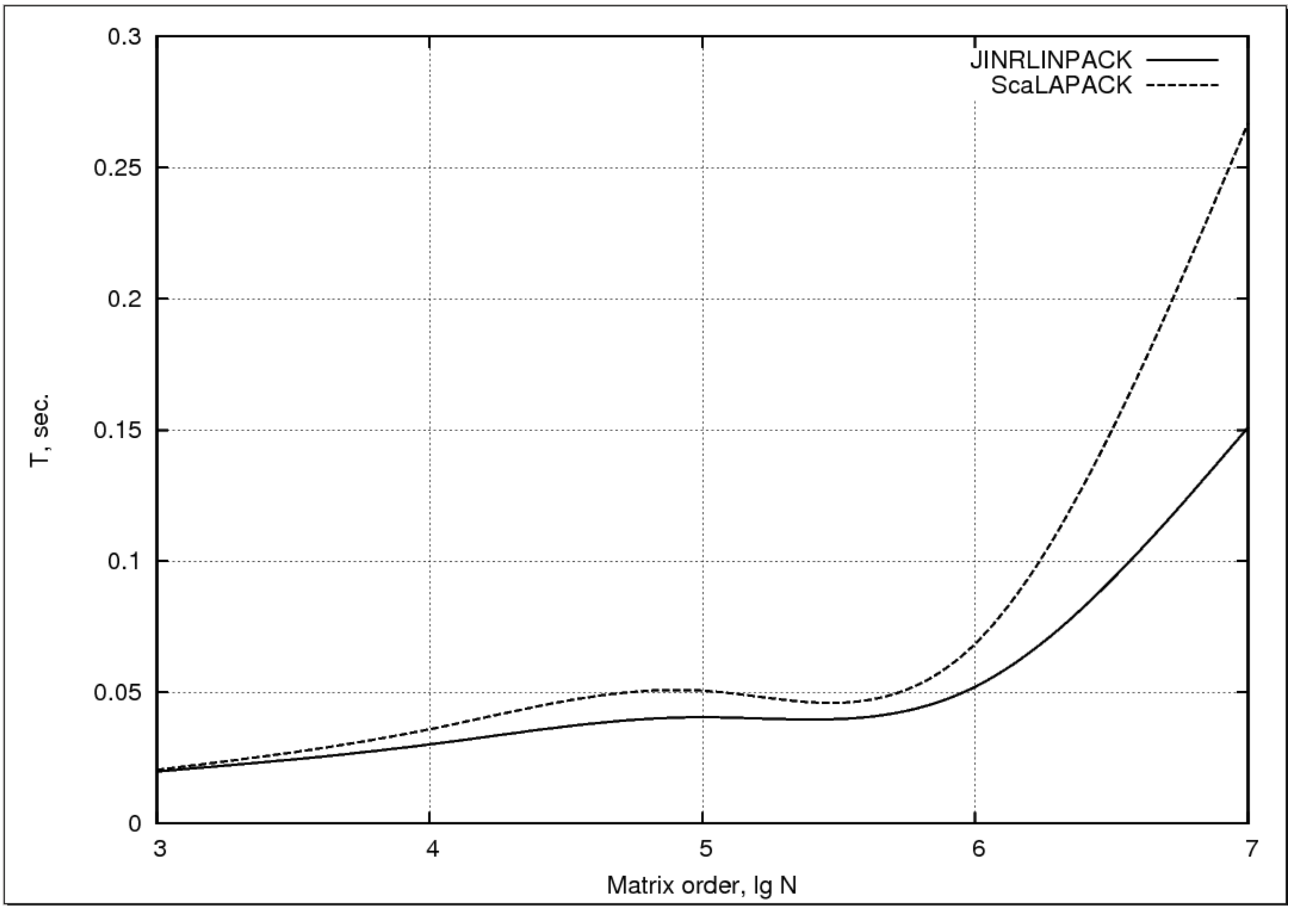

Рис. 1. Сравнения характеристик параллельных алгоритмов JINRLINPACK и ScaLAPACK

Заключение

В настоящей работе был приведен краткий обзор круга задач, решаемых численными методами линейной алгебры. Основное внимание уделено методам решения систем уравнений с (блочно-) трехдиагональными матрицами.

Приведены также параллельные алгоритмы решения систем уравнений с трехдиагональными матрицами общего вида. Показана структурная идентичность алгоритмов для систем с хорошо обусловленными матрицами и систем с плохо обусловленными матрицами.

Созданная программа в сравнении с пакетом ScaLAPACK показывает, в среднем, лучшие характеристики по времени вычисления.

Список литературы

1. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решений сеточных уравнений – М.: Наука, 1985.
2. Марчук Г.И., Колесов В.Е. Применение численных методов для расчета нейтронных сечений – М.: Атомиздат, 1970.
3. Ильин В.П. Численные методы решения задач электрофизики – М.: Наука, 1985.
4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы – М.: Наука, 1989.
5. Емельяненко Г.А. Методы обращения квазитрехдиагональных и ленточных матриц // Препринт ОИЯИ Р11-693. – Дубна: ОИЯИ, 1973.
6. Будагов Ю.А. и др. О некоторых вопросах эффективной оценки кинематических параметров заряженных частиц с учетом множественных случайных факторов в экспериментах по физике высоких энергий // Препринт ОИЯИ Р10-9950. – Дубна: ОИЯИ, 1976.

7. Емельяненко Г.А., Одинцов В.Г., Рахмонов Т.Т. Использование факторизованных представлений квазитрехдиагональных матриц со всеми отличными от нуля (а также некоторыми обращающими в нуль) главными блочными угловыми минорами // Препринт ОИЯИ Р11-88-598. – Дубна: ОИЯИ, 1988.
8. Cuarer E. et al. The shell model as a unified view of nuclear structure // Rev. of Mod. Phys. – 2005. – Vol. 77 (2). – Pp. 427-488.
9. Lanczosh Cornelius A simple recursion method for solving a set of linear equations // Bull. Amer. Math. Soc. – 1936, 42. – № 5, 325.
10. Wang Lanfa, Zhang Chuang. High Energy Phys. and Nucl. Phys. – 2001. – Vol. 25 (12). – Pp. 1219-1224.
11. Fernandez F.M., Guardiola R. An improved algorithm to determine the density of resonance states using the stabilization method // J. of Phys. A, Math. and Gen. – 1997. – Vol. 30 (9). – Pp. 3101-3105.
12. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. – М.: Мир, 1999.
13. Малышев А.Н., Введение в вычислительную линейную алгебру (с приложением алгоритмов на ФОРТРАНе). – Новосибирск: Наука, 1991.
14. Marchetti D.H.U., Da Viega P.A.F., Hurd T.R., The 1/*N*-expansion as a perturbation about the mean field theory: a one-dimensional fermi model // Communication in Math. Phys. –1996. – Vol. 179 (3). – Pp. 623-646.
15. Tanaka Y. et al. A matrix method for resistive MHD stability analysis of axisymmetric toroidal plasma // Comput. Phys. Commun. – 1985. – Vol. 38 (3). – Pp. 339-346.
16. Uhlig Frank. Report on the 10th ILAS Conference «Challenges in Matrix Theory» at Auburn university in June 2002: Докл. [10 Conference of the International Linear Algebra Society, Auburn, Ala, 2002] // Linear Algebra and Its Appl. – 2004. – 379. – Pp. 503-535.
17. Emel'yanenko G.A. et al. On efficiency of critical-component method for solving degenerated and ill-posed systems of linear algebraic equations // JINR Preprint E11-98-302. – Dubna: JINR, 1998. – P. 30.
18. Годунов С.К. Решение систем линейных уравнений. – Новосибирск: Наука СО, 1980.
19. Emel'yanenko G.A., Rakhmonov T.T., Dushanov E.B. Critical-component method for solving systems of linear equations with a tridiagonal matrix of the general form // JINR Preprint E11-96-105. – Dubna, JINR, 1996.
20. Dushanov E., Aripov G. Development of methods for computer identification of neutron captures gamma spectra // Proceedings of the Third Eurasian Conference «Nuclear Science and its Application», October 5-8. – 2004.
21. Dushanov E., Tukhliev Z. Generalized sequence and its application for determine the density of resonance states: International Conference «Mathematical Modeling and Computational Physics», Dubna, July 7-11. – 2009.
22. Dushanov E.B., Emelianenko M.G., Konovalova G.Yu On formats of the representation of real numbers and algorithm for automatic declaration of constants of the computer real arithmetic. – JCMSE, 2002. – Vol. 2. – № 1-2. – Pp. 57-62.
23. Емельяненко Г.А., Душанов Э.Б., Емельяненко М.Г., Рахмонов Т.Т., Сапожников А.П. Машинно-независимый пакет программ JINRLINPACK для решения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений // Сообщение ОИЯИ, Р11-2000-287. – Дубна, ОИЯИ. – С. 47. – [Электронный ресурс]. URL: http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/f499/f499.htm.
24. ScaLAPACK Users' Guide / Blackford L.S. et al. Society for Industrial and Applied Mathematics. PA, Philadelphia, 1997. – [Электронный ресурс]. URL: http://www.netlib.org/scalapack.