On parallel least squares approaches in Krylov subspaces

V.P.Il'in

The Institute of Computational Mathematics
and Mathematical Geophysics, SBRAS,
Novosibirsk State University

International Conference
"Russian Supercomputing Days"

Moscow, 25-26, September, 2017

Содержание

- Современные вызовы вычислительной алгебры
- "Неоклассические" мульти-предобусловленные методы в подпространствах Крылова
- Гибридное распараллеливание в алгебро-геометрических методах декомпозиции
- Методы наименьших квадратов (МНК) крыловского типа
- Комбинированные алгоритмы чебышевского ускорения и МНК

Литература

1. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear System. N.-Y.: PWS Publ 2002.
2. Ильин В.П. Методы и технологии конечных элементов. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2007, 370 с.
3.Il'in V.P. On the parallel strategies in mathematical modeling. Lecture notes, CCIS, Springer, vol.753, 2017, 69-81
4.Ильин В.П. Least Squares Methods in Krylov Subspaces. Journal of Mathematical Sciences, 224(6), 2017, 900-910
5.Dolean V., Jolivet P., Nataf F. An Introduction to Domain Decomposition Methods: algorithms, theory and parallel implementation,https://archives-ouvertes.fr/cel-01100932.

Современные задачи и проблемы вычислительной алгебры

- Вопросы производительности и ресурсоемкости решения сверхбольших разреженных СЛАУ
- Масштабируемое распараллеливание, отображение алгоритмов на архитектуру МВС
- Тенденции развития алгебраического программного обеспечения
- Концепция интегрированного алгебраического программного окружения

Проблемы решения больших разреженных СЛАУ

$$Au = f, \quad A = \{a_{i,j}\} \in \mathcal{R}^{N,N}, \quad u = \{u_i\}, f = \{f_i\} \in \mathcal{R}^N,$$

$$(Av, v) \geq \delta \|v\|^2, \quad \delta > 0, \quad (v, w) = \sum_{i=1}^{N} v_i w_i, \quad \|v\|^2 = (v, v),$$

$$N \geq 10^{10}, \ \mathrm{cond}(A) = \nu_{\max}/\nu_{\min} \geq 10^{13}$$

Типы матриц:
вещественные и комплексные,
симметричные и несимметричные,
эрмитовые и неэрмитовые, положительно
определенные и знаконеопределенные,
разреженные сжатые форматы,
стандартная двойная точность

Блочные (мульти-предобусловленные) методы полусопряженных направлений (MP-SCD)

$$
\begin{aligned}
&r^0 = f - Au^0 \;, p_l^0 = B_{0,l}^{-1} r^0, \;\; l = 1, ..., M_o \;\; n = 0, 1, ..., \;\; 0 \le q \le n : \\
&u^{n+1} = u^n + P_n \bar{\alpha}_n = u^q + P_q \bar{\alpha}_q + \cdots + P_m \bar{\alpha}_n \\
&r^{n+1} = r^n - AP_n \bar{\alpha}_n = r^q - AP_q \bar{\alpha}_q - ... - AP_n \bar{\alpha}_n, \\
&P_n = (p_1^n ... p_{M_n}^n) \in \mathcal{R}^{N,M_n}, \quad \bar{\alpha}_n = (\alpha_{n,1}, ..., \alpha_{n,M_n})^T \in \mathcal{R}^{M_n}.
\end{aligned}
$$

условия ортогональности:

$$
\begin{gathered}
(Ap_k^n, A^\gamma p_{k'}^{n'}) = \rho_{n,k}^{(\gamma)} \delta_{n,n'}^{k,k'}, \quad \rho_{n,k}^{(\gamma)} = (Ap_k^n, A^\gamma p_k^n), \\
\gamma = 0, 1; \;\; n' = 0, 1, ..., n-1; \;\; k, k' = 1, 2, ..., M_n,
\end{gathered}
$$

следствие: $(r^{n+1}, A^\gamma p_k^{n'}) = 0, \;\; n' = 0, 1, ..., n.$

Методы полусопряженных градиентов ($\gamma = 0$, SCG) и невязок ($\gamma = 1$, SCR)

$$r^{n+1} = r^n - A\sum_{l=1}^{M_n}\alpha_{n,l}p_l^n = r^q - A\Big(\sum_{l=1}^{M_q}\alpha_{q,l}p_l^q - ... - \sum_{l=1}^{M_n}\alpha_{n,l}p_l^n\Big),$$

$$\Phi_n^{(\gamma)}(r^{n+1}) \equiv (r^{n+1}, A^{\gamma-1}r^{n+1}) = (r^q, A^{\gamma-1}r^q) -$$

$$-\sum_{k=q}^{n}\sum_{l=1}^{M_n}\alpha_{k,l}[2(r^q, A^{\gamma}p_q^k) - \alpha_{k,l}(Ap_l^k, A^{\gamma}p_l^k)]$$

вариационные свойства:

$$\partial\Phi_n^{(\gamma)}/\partial\alpha_{k,l} = 0, \quad M^{(n)} = M_0 + ... + M_n, 0 \leqslant q \leqslant n,$$

$$\alpha_{k,l}^{(\gamma)} = (r^q, A^{\gamma}p_l^k)/\rho_{k,l}^{(\gamma)}, \quad l = 1, ..., M_n; \quad k = q, q+1, ..., n,$$

$$A = A^T : \gamma = 0, SCG -> CG; \gamma = 1, SCR -> CR$$

Минимизация невязки в SCR

$$\Phi_n^{(\gamma)}(r^{n+1}) = (r^q, r^q) - \sum_{k=q}^{n} \sum_{l=1}^{M_n} (r^q, A^\gamma p_l^k)^2 / \rho_{k,l}^{(\gamma)}$$

если $\quad A = A^T$ или $\quad \gamma = 1: \;\; \Phi_n^{(\gamma)}(\alpha_{k,l}^{(\gamma)}, r^{n+1}) = min$

блочные подпространства Крылова $(\mathrm{q}_{n,l} = B_{n,l}^{-1} r^n)$:

$$\mathcal{K}_M(r^0, A) = \mathrm{span}\{q_{0,1}, ..., q_{0,M_0},$$
$$Aq_{1,1}, ..., Aq_{1,M_1}, ..., A^n q_{n,1}, ..., A^n q_{n,M_n}\},$$
$$M = M_0 + M_1 + ... + M_n,$$

$M \gg 1 \Rightarrow$ селективное мульти-предобусловливание

Направляющие мульти-предобусловленные векторы:

$$p_l^0 = B_{0,l}^{-1} r^0, \quad p_l^{n+1} = B_{n+1,l}^{-1} r^{n+1} - \sum_{k=0}^{n} \sum_{l=1}^{M_k} \beta_{n,k,l}^{(\gamma)} p_l^k, \; n = 0, 1, ...;$$

$$B_{n,l} \in \mathcal{R}^{N,N}, \quad l = 1, ..., M_n; \quad \gamma = 0, 1,$$

$$\bar{\beta}_{n,k}^{(\gamma)} = \{\beta_{n,k,l}^{(\gamma)}\} = (\beta_{n,k,1}^{(\gamma)} ... \beta_{n,k,M_n}^{(\gamma)})^T \in \mathcal{R}^{M_n}$$

A^γ**-ортогонализация Грама-Шмидта**

$$\beta_{n,k,l}^{(\gamma)} = (A^\gamma p_l^k, A q_{n+1,l}) / \rho_{n,l}^{(\gamma)}, \quad n = 0, 1, ...;$$

$$k = 0, ..., n; \quad l = 1, ..., M_n, \quad q_{n+1,l} = B_{n+1,l}^{-1} r^{n+1}$$

устойчивость: модифицированная
A^γ**- ортогонализация Грама-Шмидта**

Ускорение рестартовых итераций методами наименьших квадратов

$m_s = m$-**период рестарта,** s-**номер рестарта**
стандартный рестарт: $r^{ms} = f - Au^{ml}$
ускоренные рестарты: $s = 1, 2, ...,\quad \gamma = 0, 1$:

$$n = 0, 1, ..., m(s-1), m(s-1)+1, ..., ms...; s = 1, 2, ...,$$

$$V_s = \{v^{(s)} = p^{m(s-1)}\}, W_s = \{w^{(s)} = Av^{(s)}\} \in \mathcal{R}^{N,s}$$

Коррекция рестартов $((\hat{r}^{ms}, \hat{r}^{ms}) = \min)$**:**

$$\hat{u}^{ms} = u^{ms} + c_1 v^1 + ... + c_s v^s = u^{ms} + V_s c^{(s)},$$

$$\hat{r}^{ms} = r^{ms} - c_1 w^1 - ... - c_s w^{(s)} = r^{ms} - W_s c^{rs)},$$

$$W_s c^s = r^{ms},\ B_s c^{(s)} = g^{(s)},\ B_s = W_s^T W_s,\ g^{(s)} = W_s^T r^{ms}$$

Примеры рестартовых итераций

a. длинные рекурсии

- полусопряженные направления (SCG или SCR)
- ортогонализация Арнольди (GMRES, FOM)

b. короткие рекурсии

- сопряженные направления (CG, CR)
- бисопряженные направления (BiCG, BiCR,...)

c. спектральные чебышевские ускорения

- циклический итерационный процесс

$$u^n = u^{n-1} + \tau_n r^{n-1}, \qquad r^n = f - Au^n, \qquad n = 1, \ldots, m,$$

$$\tau_n = 2 / \left[\lambda_N + \lambda_1 - (\lambda_N - \lambda_1) \cos \frac{(2n-1)\pi}{2m} \right].$$

Трехчленные чебышевские процессы

$$u^1 = u^0 + \tau\, r^0, \;\; \tau = 2/(\lambda_1 + \lambda_N), \;\; r^n = f - Au^n,$$

$$u^{n+1} = u^n + \tau_n \tau\, r^n + (\tau_n - 1)(u^n - u^{n-1}), \;\; \tau_0 = 2,$$

$$\tau_n = 4/(4 - \tau_{n-1}\gamma^2), \;\; \gamma = (C-1)/(1+C), \quad C = \lambda_N/\lambda_1.$$

$$p^0 = r^0 = f - Au^0, \;\; u^n = u^{n-1} + \alpha_{n-1} p^{n-1},$$

$$r^n = r^{n-1} - \alpha_{n-1} A p^{n-1}, \;\; p^n = r^n + \beta_n p^{n-1}.$$

$$\alpha_0 = \tau, \;\; \alpha_n = \tau_n \tau, \;\; \beta_n = (\tau_n - 1)\alpha_{n-1}/\alpha_n.$$

$$||r^m||/||r^0|| \leqslant \varepsilon_m = \min_{\tau_1 \dots, \tau_m} \left\{ \max_{\lambda \in [\lambda_1, \lambda_N]} \{|P_m(\lambda)|\} \right\}$$

$$P_m(\lambda) = T_m \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_N - 2\lambda}{\lambda_N - \lambda_1} \right) \Big/ T_m \left(\frac{\lambda_N + \lambda_1}{\lambda_N - \lambda_1} \right).$$

$$n(\varepsilon_m) \leqslant 0,5 |\ln(\varepsilon_m/2)| \sqrt{C} + 1.$$

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

THANKS FOR ATTENTION