

# Párhuzamosított idődiszkretizáló módszerek

Kupás Vendel Péter

Témavezető: Fekete Imre

2022. május 12.

Folytattam az előző félévben elkezdett témát. Olyan párhuzamosított numerikus módszerekről tanultam, melyeket differenciálegyenletek megoldására lehet használni. Ebben a félévben is új módszerek megértésével töltöttem az időm nagy részét.

Időfüggő differenciálegyenlet numerikus megoldására alkalmazhatunk klasszikus egy-lépéses módszereket. Ekkor a zárt időintervallumot felosztjuk  $t_0, t_1, \dots, t_N$  pontokra és a  $t_{i-1}$  pontbeli közelítésből kiszámoljuk a  $t_i$  pontbeli közelítést. Ebben a tipikus esetben sok szekvenciális lépést kell végrehajtanunk. A mai processzorok lassan elérik maximális teljesítőképességük határát, így a többmagos számítógépek megjelenése óta természetes igény alakult ki a párhuzamosítható idődiszkretizációs módszerek felé.

Ezeket a módszereket aszerint csoportosíthatjuk, hogy milyen számításokat végeznek párhuzamosan. Térbeli párhuzamosításról akkor beszélünk, ha a tér irányában számolunk egyszerre több értéket. Ilyen jól ismert eljárás többek között a klasszikus többrácsos (multigrid, a továbbiakban MG) módszer.

Az időbeli párhuzamosító módszerek során egy lépésben több időbeli rácspontban végezzük párhuzamosan a számításokat. A valóságban az idő egyirányú, egy differenciálegyenlet megoldása egy adott időpontban befolyásolja, hogy a későbbiekben miként fog viselkedni, így ebben az esetben nem magától értetődő párhuzamosítás megvalósítása.

A továbbiakban az időbeli többrácsos redukciós (Multigrid Reduction In Time, a továbbiakban MGRIT) módszert fogom bemutatni, amely egy többrácsos módszeren alapuló időben párhuzamosított módszer. A módszer alapötlete az, hogy egy egy-lépéses módszert alakít át időben párhuzamossá, azaz ha valakinek van egy nagyon jól használható egy-lépéses módszere, akkor csak implementálnia kell a megfelelő környezetben és élvezheti a MGRIT által adott gyorsítást. Az XBraid szoftver a MGRIT módszert implementálja, mely egy publikus GitHub repozitóriumban elérhető [4].

# 1. Az MGRIT módszer

## 1.1. Egylépéses módszerek

Tekintsük az

$$u'(t) = f(t, u(t)), \quad t \in (0, T]$$

$$u(0) = u_0$$

kezdetiérték-feladatot és osszuk fel a  $[0, T]$  időintervallumot a  $t_0, t_1, \dots, t_N$  pontokkal. Ekkor minden egylépéses módszer  $\Phi_i(\cdot)$  függvényekkel és  $g_i$  konstansokkal felírható az

$$u_i = \Phi_i(u_{i-1}) + g_i, \quad i = 1, \dots, N$$

$$u(0) = u_0$$

alakban, ahol  $u_i$  az  $u(t_i)$  közelítése. Ha  $f$  lineáris és a módszer időfüggetlen, azaz ha  $\Phi_i(u_{i-1}) = \Phi u_{i-1}$  ( $i = 1, \dots, N$ ), akkor a módszer által adott eredmény megegyezik az  $Au = g$  lineáris egyenletrendszer megoldásával, ahol

$$A = \begin{bmatrix} I & & & & \\ -\Phi & I & & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -\Phi & I \end{bmatrix}.$$

## 1.2. Többrácsos (MG) módszerek

A klasszikus elliptikus differenciálegyenletek (Laplace- vagy Poisson-feladatok) egyik legjobban bevált megoldási módszere az MG módszer, amely több rácson végzett műveletek segítségével határoz meg egy közelítő megoldást. Azaz minden  $\Omega_l$ ,  $l = 1, \dots, L$  rácshoz tartozik egy  $A_l u = g_l$  lineáris egyenletrendszer, ahol  $A_l$  a differenciáloperátor diszkretizálásából származó véges differencia együttható mátrixot, míg  $l$  az aktuális szintek számát jelöli.

A kétrácsos MG módszernél 2 rácunk (szintünk) van, egy finom és egy durva. Természetesen a feladat közelítő megoldását a finom rácson szeretnénk meghatározni. Az optimális műveletszám érdekében az elérhető megoldást elősimítjuk és az ezzel nyert maradékvektort (reziduálist) leszűkítjük (restriktáljuk) a durva rácshálóra. A már szignifikánsabb kisebb méretű durva rácshálón az egyenletrendszert direkt módon megoldjuk, majd utósimítjuk és interpoláljuk (prolongáljuk) a finom rácshálóra. Az így kapott klasszikus eljárás az ún. V-ciklus, melyet a gyakorlatban többször is meghívunk. A szűkítés és az interpolálás az azonos dimeziószám elérése miatt fontos, és ezeket az operátorokat a gyakorlatban adott mátrixokkal reprezentáljuk. Az elő- és utósimítás szerepe pedig abban

áll, hogy nemtriviális magtér okozta problémát és az abból adódó sajátfüggvény oszcillációját feloldja. Az elő- és utósimitást klasszikus iteratív eljárásokkal (csillapított Jacobi- vagy Gauss–Seidel-iterációkkal) végezzük [2].

A többrácsos eset hasonlóan, rekurzív módon kezelhető. Az MG eljárást nemcsak klasszikus elliptikus, hanem időfüggő parciális differenciálegyenletre is szokták alkalmazni. Ebben az esetben az időtengelyt nem különböztetjük meg a térbeli dimenziótól és ekkor a módszert tér-idő (space-time) MG módszernek hívjuk.

### 1.3. Parareal algoritmus

A parareal kezdetiérték-feladatra alkalmazható idő-párhuzamosítható eljárást 2001-ben Lions, Maday és Turicini vezette be [3]. Jelölje a  $[0, T]$  időintervallum  $\delta t$  lépésközű felosztását  $\{t_i\}_{i=0}^N$  és az  $m\delta t$  lépésközű felosztását  $\{T_j\}_{j=0}^{N/m}$ . Előbbi a finom, utóbbi pedig a durva rács analógiája. Alkalmazzuk az  $F$  egy lépéses módszert a finom, míg a  $G$  egy lépéses módszert a durva rácson. Ekkor  $F$  tekinthető egy a durva rácson értelmezett nagyobb pontosságot adó egy lépéses módszernek.

A Parareal algoritmus a durva rács  $T_0, T_1, \dots, T_{N/m}$  időpontokban értelmezett kezdeti  $U_j^0$ ,  $j = 0, \dots, N/m$  közelítéssel indul, melyet tipikusan a  $G$  módszer szekvenciálisan alkalmazásával kaphatunk meg. Amennyiben  $G(t_2, t_1, u_1)$  jelöli a  $G$  egy lépéses módszer eredményét a  $t_2$  pontban az  $u(t_1) = U_1$  feltétel mellett, akkor a kezdeti közelítést az

$$U_0^0 = u_0, \quad U_{n+1}^0 = G(T_{n+1}, T_n, U_n^0)$$

összefüggéssel nyerjük. Ekkor a Parareal algoritmus az

$$U_{n+1}^{k+1} = F(t_{n+1}, t_n, U_n^k) + G(t_{n+1}, t_n, U_n^{k+1}) - G(t_{n+1}, t_n, U_n^k), \quad n = 0, \dots, N-1, \quad k = 0, 1, \dots$$

korrekciós sémát jelenti. Itt az  $F$  módszert tudjuk párhuzamosan futtatni a durva rácspontok között, azaz az  $F(t_{n+1}, t_n, U_n^k)$  értékeket egyszerre tudjuk kiszámítani.

Korábban feltettük, hogy lineáris feladatunk és időfüggetlen módszerünk van. Legyen  $Au = g$  a finom rácstra alkalmazott  $F$  egy lépéses módszer egyenletrendszere,  $A_\Delta u_\Delta = g_\Delta$  az  $F$  egy lépéses módszer durva rácshoz tartozó egyenletrendszere, míg  $B_\Delta u_\Delta = g'_\Delta$  a durva rácstra alkalmazott  $G$  egy lépéses módszer egyenletrendszere. Ekkor a fenti korrekciós séma az

$$u_\Delta^{k+1} = u_\Delta^k + B_\Delta^{-1}(g_\Delta - A_\Delta u_\Delta^k)$$

alakot ölti.

Alkalmazzuk a kezdetiérték-feladatra a következő kétrácsos MG módszert.

---

**1. Algoritmus** Parareal kétrácsos MG módszerként

---

Az  $Au = g$  rendszer relaxálása F-relaxációval

$$r_\Delta = R_I(g - Au^k)$$

Oldjuk meg a  $B_\Delta v = r_\Delta$  rendszert

$$u^{k+1} = u^k + Pv$$

---

Az  $F$ -relaxáció azt jelöli, hogy minden durva pontok által meghatározott intervallumban szekvenciálisan lépünk az  $F$  módszerrel a finom pontokon. Ezt párhuzamosan tudjuk végrehajtani és az elősimitás analógiája. Az  $R_I$  leszűkítő és  $P$  interpolációs mátrixot alkalmas megválasztásával éppen a parareal algoritmussal megegyező eljárást kapunk [1].

## 1.4. MGRIT

Az előző kétrácsos eljárás többrácsossá történő természetes kiterjesztése nem vezet hatékony algoritmushoz, így az  $F$ -relaxáció helyett ún.  $FCF$ -relaxációt hajtunk végre, ahol egy  $C$ -relaxációban a durva pontokban felvett értéket frissítjük az  $F$ -módszerrel az előző finom pontból.

Vegyük az  $\Omega_l$ ,  $l = 0, 1, \dots, L$  felosztásokat a  $\delta t$ ,  $m\delta t$ , stb lépésközzel egy  $m$  durvító tényezővel és minden felosztáson használjunk egy egylépéses módszert. Általában minden szinten ugyanazt a módszert használjuk. Jelölje  $A_l u^{(l)} = g^{(l)}$  az  $\Omega_l$ -hez tartozó lineáris egyenletrendszert, ahol  $A_l$  mátrixot a  $\Phi_l$  mátrix határozza meg.

---

**2. Algoritmus** MGRIT(1)

---

**if**  $l$  a legdurvább szint **then**

Oldjuk meg az  $A_L u^{(L)} = g^{(L)}$  rendszert

**else**

Az  $A_l u^{(l)} = g^{(l)}$  rendszer relaxálása FCF-relaxációval

Reziduális számítása és szűkítése injekcióval:  $g^{(l+1)} = R_I(g^{(l)} - A_l u^{(l)})$

Megoldás a következő szinten:  $MGRIT(l + 1)$

$$u^{(l)} = u^{(l)} + Pu^{(l+1)}$$

**end if**

---

Ez az algoritmus csak lineáris feladatokra használható, viszont viszonylag egyszerűen kiterjeszthető nemlineáris feladatokra is a teljes approximációs séma (Full Approximation Scheme, rövidítve FAS) segítségével. Ekkor az egylépéses módszerekhez tartozó  $\Phi_l$  egy térbeli nemlineáris függvény, így az  $A_l$  is egy rácspontokon értelmezett nemlineáris függvény.

---

### 3. Algoritmus MGRIT-FAS(1)

---

**if**  $l$  a legdurvább szint **then**

Oldjuk meg az  $A_L(u^{(L)}) = A_L(R_I(u^{(L-1)})) + g^{(L)}$  rendszert

**else**

Az  $A_l(u^{(l)}) = g^{(l)}$  rendszer relaxálása FCF-relaxációval

Reziduális számítása és szűkítése injekcióval:  $g^{(l+1)} = R_I(g^{(l)} - A_l(u^{(l)}))$

Megoldás a következő szinten:  $MGRIT(l + 1)$ .

$e^{(l+1)} = u^{(l+1)} - u^{(l)}$

$u^{(l)} = u^{(l)} + P'e^{(l+1)}$

Az  $A_l(u^{(l)}) = g^{(l)}$  rendszer relaxálása F-relaxációval

**end if**

---

Az MGRIT módszernek sokféle variánsa van, melyeknek az alapja az előbb leírt algoritmus. Megválaszthatjuk például a durvítás mértékét, eldönthetjük, hogy milyen egy lépéses módszereket használunk, meghatározhatjuk a rekurzív hívások sorrendjét, vagy alkalmazhatunk konvergenciát gyorsító plusz eljárásokat.

## 2. Eredmények

Az irodalomban található mérések azt mutatják, hogy ha sok processzorral rendelkezünk, akkor a MGRIT algoritmus hatékonyan használható parabolikus parciális differenciál-egyenletek megoldásának numerikus közelítésére. Az [1] cikk szerzői - akik az MGRIT algoritmust bevezették - az eljárást a

$$\partial_t u(t, x) - \kappa \Delta u(t, x) = b(t, x), \quad x \in \Omega = [0, \pi]^d, \quad t \in (0, T], \quad \kappa > 0$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \Omega$$

$$u(t, x) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in [0, T]$$

homogén Dirichlet peremfeltételű hővezetési egyenleten tesztelték. A két- és háromdimenziós feladatban a jobboldali és a kezdeti függvények egyszerű szinuszos függvények voltak, a diffúziós együtthatót  $\kappa = 1$ -nek választották. Térben a klasszikus másodrendű 5-pontos stencil, míg időben az implicit Euler módszert alkalmazták.

A tér-idő tartományt egyenletesen osztották fel a processzorok között, azaz mind-egyikhez körülbelül ugyanannyi rácspont tartozott a legfinomabb rácshálón és a módszer állítható paramétereit optimalizálták a problémára.

A várakozásoknak megfelelően kevés processzor esetén az egy lépéses módszer gyorsabb. Ahogy az a lenti ábrán is látható, ha legalább 256 processzor áll rendelkezésünkre, akkor előnyös az MGRIT módszert használni. Továbbá 4096 processzor esetén már jelentős, 20-szoros gyorsítást lehet elérni.

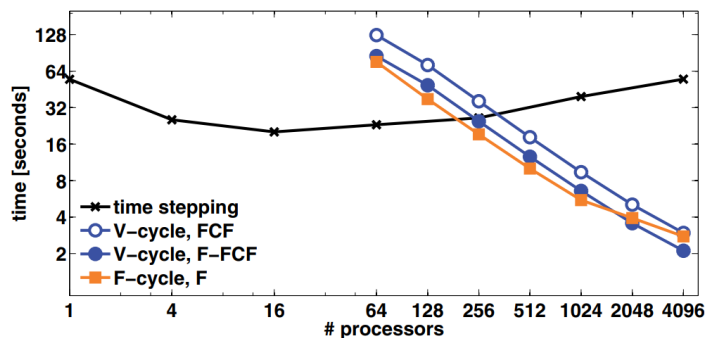


FIG. 9. Time to solve Implicit2D( $T = \pi^2$ ) on a  $129^2 \times 16,385$  space-time grid using sequential time stepping and three MGRIT variants.

1. ábra. A futási idő a processzorszám tekintetében az egyes eljárásokra nézve [1].

### 3. A következő félév terve

Szeretnénk kipróbálni saját magunk is az algoritmust különböző feladatokon. Sajnos a nagy processzorszám igény miatt erre itthon eleve nem sok helyen van lehetőség, ráadásul a szuperszámítógépes futtatás külön szakértelmet igényel. Fekete Imre témavezetőm szuperszámítógépes specialista kollégájával, Sidafa Condeval (Sandia Nemezeti Laboratórium, Egyesült Államok) felvette a kapcsolatot a futtatás ügyében.

A végső cél pedig annak a tanulmányozása, hogy az MGRIT eljárás milyen gyorsítást (számításmatematikai költség megtakarítást) jelent a jelenleg használt adaptív időbeli eljárásokkal szemben neurális differenciálegyenletek veszteségfüggvényeinek optimalizálása során.

## Hivatkozások

- [1] R. D. Falgout, S. Friedhoff, Tz. V. Kolev, S. P. MacLachlan, and J. B. Schroder: *Parallel Time Integration with Multigrid*, SIAM J. Sci. Comput., 36 (2014), pp.C635-C661. LLNL-JRNL-645325.
- [2] Horváth Róbert, Izsák Ferenc, Karátson Kános: *Parciális differenciálegyenletek numerikus módszerei számítógépes alkalmazásokkal*, Elektronikus jegyzet, 2013
- [3] J.-L. Lions, Y. Maday, and G. Turnici: *A parareal in time discretization of PDEs*, C.R. Acad. Sci. Paris, Serie I, 332 (2001), pp. 661-668.
- [4] XBraid: Parallel multigrid in time. <http://llnl.gov/casc/xbraid>