VILNIAUS UNIVERSITETAS

Rima

KRIAUZIENĖ

Didelės skaičiavimo apimties neklasikinių uždavinių sprendimo lygiagretieji algoritmai

**DAKTARO DISERTACIJOS SANTRAUKA**

Gamtos mokslai,

informatika N 009

|  |
| --- |
| VILNIUS 2019 |

Disertacija rengta 2015–2019 metais Vilniaus universitete.

**Mokslinis vadovas:**

**prof. habil. dr. Raimondas Čiegis** (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, gamtos mokslai, informatika – N 009).

**Mokslinis konsultantas:**

**prof. dr. Julius Žilinskas** (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, informatika – N 009).

Gynimo taryba:

**pirmininkas –** **prof. dr. Rimantas Vaicekauskas** (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, informatika – N 009).

**Nariai:**

**prof. habil. dr. Rimantas Barauskas** (Kauno technologijos universitetas, gamtos mokslai, informatika – N 009),

**prof. dr. Jaan Janno** (Talino technologijos universitetas, gamtos mokslai, matematika – N 001),

**prof. habil. dr. Genadijus Kulvietis** (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, technologijos mokslai, informatikos inžinerija – T 007),

**prof. habil. dr. Leonidas Sakalauskas** (Vilniaus universitetas, technologijos mokslai, informatikos inžinerija – T 007).

Disertacija ginama viešame Gynimo tarybos posėdyje 2020 m. sausio mėn. 8 d. 12 val. Vilniaus universiteto Duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų instituto 203 auditorijoje.

Adresas: Akademijos g. 4, LT-08412, Vilnius, Lietuva.

Disertacijos santrauka išsiuntinėta 2019 m. gruodžio mėn. 7 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilniaus univeristeto bibliotekoje ir VU interneto svetainėje adresu: *https://www.vu.lt/naujienos/ivykiu-kalendorius*

VILNIUS UNIVERSITY

Rima

KRIAUZIENĖ

Parallel algorithms for non-classical problems with big computational costs

**SUMMARY OF DOCTORAL DISSERTATION**

Natural Sciences,

Informatics N 009

|  |
| --- |
| VILNIUS 2019 |

This dissertation was written between 2015 and 2019 at Vilnius University.

**Academic supervisor:**

**Prof. Habil. Dr. Raimondas Čiegis** (Vilnius Gediminas Technical University, Natural Sciences, Informatics – N 009).

**Academic consultant:**

**Prof. Dr. Julius Žilinskas** (Vilnius University, Natural Sciences, Informatics – N 009).

This doctoral dissertation will be defended in a public meeting of the Dissertation Defence Panel:

**Chairman – Prof. Dr. Rimantas Vaicekauskas** (Vilnius University, Natural Sciences, Informatics – N 009).

**Members:**

**Prof. Habil. Dr. Rimantas Barauskas** (Kaunas University of Technology, Natural Sciences, Informatics – N 009),

**Prof. Dr. Jaan Janno** (Tallinn University of Technology, Natural Sciences, Mathematics – N 001),

**Prof. Habil. Dr. Genadijus Kulvietis** (Vilnius Gediminas Technical University, Technological Sciences, Informatics Engineering –T 007),

**Prof. Habil. Dr. Leonidas Sakalauskas** (Vilnius University, Natural Sciences, Informatics – N 009).

The dissertation shall be defended at a public meeting of the Dissertation Defence Panel at 12:00 a. m. on the 8th of January 2020 in Room 203 of the Institute of Data Science and Digital Technologies of Vilnius University. Address: Akademijos street 4, LT-08412, Vilnius, Lithuania.

The summary of the doctoral dissertation was distributed on the 7th of December, 2019. The text of this dissertation can be accessed at the library of Vilnius University, as well as on the website of Vilnius University: *https://www.vu.lt/naujienos/ivykiu-kalendorius*

# TURINYS

[1. Tyrimo sritis ir problemos aktualumas 6](#_Toc25300756)

[2. Tyrimo objektas 8](#_Toc25300757)

[3. Darbo tikslas ir uždaviniai 8](#_Toc25300758)

[4. Tyrimo metodai 10](#_Toc25300759)

[5. Darbo mokslinis naujumas 10](#_Toc25300760)

[6. Disertacijos praktinė vertė 11](#_Toc25300761)

[7. Ginamieji teiginiai 11](#_Toc25300763)

[8. Disertacijos rezultatų aprobavimas 12](#_Toc25300764)

[9. Disertacijos struktūra 13](#_Toc25300765)

[10. Padėka 14](#_Toc25300766)

[11. Lygiagrečiųjų algoritmų sudarymas uždaviniams su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laips-niu 15](#_Toc25300767)

[12. Vienmatės Šriodingerio lygties pralaidžių kraš-tinių sąlygų sudarymas 16](#_Toc25300768)

[13. Trisluoksnė lygiagretinimo schema 17](#_Toc25300769)

[14. Bendrosios išvados 19](#_Toc25300770)

[PUBLIKACIJŲ SĄRAŠAS 20](#_Toc25300771)

[TRUMPOS ŽINIOS APIE DISERTANTĄ 24](#_Toc25300772)

[Literatūros sąrašas 24](#_Toc25300774)

Santrauka

## Tyrimo sritis ir problemos aktualumas

Sprendžiant šiuolaikinius uždavinius reikia atlikti tiek daug skai-čiavimų, kad net ir pačiais greičiausiais šiuolaikiniais nuosekliaisiais kompiuteriais negalime laiku rasti atsakymo. Kitas didelių uždavinių sprendimo ribojimas – vieno kompiuterio atminties ištekliai. Skaičia-vimo lygiagretinimo technologijos padeda išspręsti abi problemas.

Disertacijoje nagrinėjami du taikomieji uždaviniai. Pirmasis užda-vinys aprašytas elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu (Nochetto et al., 2015; Bonito et al., 2018), kuris pasižymi savybe: uždavinio dimensijos didinimas labai padidina skaičiavimo sąnaudas. Šį modelį taikyti tampa patraukliau, kai naudojame lygiagrečiuosius skaičiavimus. Tačiau siekiant efektyvių lygiagrečiųjų skaičiavimų reikia taikyti tinkamus lygiagrečiuosius algoritmus ir atlikti išsamią teorinę analizę. Išnagrinėjome ir palyginome lygiagrečiuosius skai-tinius algoritmus, skirtus skirtingiems naujausiems skaitiniams meto-dams (Nochetto et al., 2015; Vabishchevich, 2015; Bonito et al., 2018; Harizanov et al., 2018), kurie pasiūlyti uždaviniams su elipsiniais ope-ratoriais, pakeltais trupmeniniais laipsniais (Nochetto et al., 2015; Bo-nito et al., 2018), spręsti. Šiame tyrime nelokalų uždavinį su-vedame į gerai žinomą lokalų elipsinio ar pseudo-parabolinio tipo di-ferencinių lygčių uždavinį, suformuluotą didesnės dimensijos erdvėje, kai elipsinis operatorius yra iš . Ištyrėme silpną ir stip-rų lygiagrečiųjų algoritmų išplečiamumą. Išspręsti dvimačiai ir trima-čiai uždaviniai, pateikta išsami konvergavimo analizė. Pagrindinis antrojo disertacijos skyriaus tikslas – nustatyti, kurie lygiagretieji al-goritmai rekomenduojami norint pasiekti tam tikrą tikslumą atitin-kamam trupmeniniui laipsniui.

Trečiajame disertacijos skyriuje nagrinėjamas antrasis uždavinys – sugeriančių kraštinių sąlygų konstravimas vienmatei Šriodingerio lygčiai (Menza, 1997; Arnold, 1998; Antoine et al., 2008; Szeftel, 2004). Naudojant klasikines kraštines sąlygas lygties sprendinys atsispindi nuo krašto ir sukelia didelių paklaidų visame intervale. Todėl tenka ženkliai didinti modeliavimo sritį, o dėl to didėja ir skaitinio algoritmo skaičiavimo sąnaudos, ir atminties reikalavimai modeliuojant ilgame laiko intervale. Taigi svarbu sukonstruoti tinkamas kraštines sąlygas ir išvengti neigiamų pasekmių, susijusių su kompiuterio atminties reikalavimais, modeliuojant ilgame laiko in-tervale. Šie neišvengiami, kai konstruojame tikslias pralaidžias kraš-tines sąlygas. Vienas iš būdų šiai problemai spręsti – sugeriančių kraš-tinių sąlygų konstravimas (Menza, 1997; Arnold, 1998; Antoine et al., 2008; Szeftel, 2004). Disertacijoje nagrinėjami metodai šioms są-lygoms konstruoti, pagrįsti tikslių pralaidžių kraštinių sąlygų aprok-simavimu racionaliosiomis funkcijomis. Nagrinėjamos skirtingos strategijos racionalių funkcijų optimaliems koeficientams rasti pasi-rinktiems uždaviniams su žinomais tiksliaisiais sprendiniais: Padé aproksimacija, Furjė (angl. *Fourier)* simbolio aproksimacija nor-moje, atspindžio koeficiento minimizavimas normoje ir kombi-nuotas metodas, paremtas minimizavimu dviejose skirtingose nor-mose. Suformuluoti minimizavimo uždaviniai yra globaliosios opti-mizacijos, jie nagrinėjami kaip „juodosios dėžės“ atvejai. Šių už-davinių tikslo funkcijos skaičiavimo sąnaudos yra pakankamai dide-lės, todėl sprendimas užima daug laiko. Siekiant greičiau atlikti eks-perimentus, reikia taikyti lygiagrečiuosius skaičiavimus. Siūloma mi-nimizavimo technika parodė, kad galima rasti koeficientų reikšmes, tinkančias dviem kokybiškai skirtingiems uždaviniams, kai sprendinių paklaidos yra gana mažos daugeliu modeliavimo atvejų.

Ketvirtajame disertacijos skyriuje siūlome bendrą metodiką, skirtą algoritmams lygiagretinti, sprendžiant trečiajame skyriuje nagrinėtus uždavinius. Siūloma lygiagretinimo strategija turi tris lygmenis. Skir-tingi šios schemos lygmenys suteikia naujų lygiagretinimo galimybių, tačiau tuo pačiu metu kyla skirtingų skaičiavimo iššūkių. Svarbi siūlomos trijų lygmenų schemos dalis yra prielaida, kad pirmajame lygmenyje egzistuoja kelios lygiagrečiosios nuosekliojo algoritmo alternatyvos. Jos gali būti ne tokios efektyvios kaip geriausias nuo-seklusis algoritmas, bet pasižymi geromis lygiagretinimo savybėmis. Pirmasis lygiagretinimo schemos lygmuo yra naujo trijų lygmenų algoritmo dalis, o šio lygmens lygiagretumo laipsnis gali būti dina-miškai pasirenkamas skaičiavimų metu. Pirmojo lygmens lygiagre-tinimas skiriasi priklausomai nuo uždavinio, todėl nėra konkrečių uni-versalių metodų. Ketvirtajame skyriuje pateikiama bendra šios sche-mos taikymo procedūra. Antrajame lygmenyje apibrėžiamas užda-vinių, kurie yra skirtingų skaičiavimo dydžių, rinkinys. Šie uždaviniai gali būti sprendžiami nepriklausomai vienas nuo kito, t.y. juos galima spręsti lygiagrečiai. Trečiajame lygmenyje apibrėžiami lygiagretieji algoritmai, kurie naudojami antrojo lygmens užduotims spręsti. Darbų skirstymui tarp procesų optimizuoti siūloma godžioji darbo krūvio paskirstymo euristika. Ji testuojama sprendžiant etaloninius už-davinius.

Norint parodyti, kad šis metodas gali būti plačiai taikomas, aptariame galimybę taikyti siūlomą trijų lygmenų lygiagretinimo schemą kitiems pavyzdžiams.

## Tyrimo objektas

Lygiagretieji algoritmai uždaviniams, susijusiems su didelėmis skaičiavimo sąnaudomis, taip pat optimizavimo uždaviniai.

## Darbo tikslas ir uždaviniai

Ištirti efektyvius lygiagrečiuosius algoritmus uždaviniams su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu, ir optimizavimo uždaviniams, reikalaujantiems didelių skaičiavimo sąnaudų.

* 1. Tyrimo uždaviniai

• Sudaryti lygiagrečiuosius algoritmus uždaviniams su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu:

* atlikti žinomų lygiagrečiųjų algoritmų galimybių analizę uždaviniams su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupme-niniu laipsniu;
* pasiūlyti ir išanalizuoti efektyvius lygiagrečiuosius algoritmus tokio tipo uždaviniams spręsti;
* atlikti pasiūlytų lygiagrečiųjų algoritmų išplečiamumo analizę;
* suformuluoti išvadas ir rekomendacijas tokio tipo uždavi-niams spręsti.

• Uždaviniai, skirti vienmatės Šriodingerio lygties pralaidžioms kraštinėms sąlygoms sudaryti:

* atlikti literatūros, skirtos vienmatės Šriodingerio lygties pralaidžioms kraštinėms sąlygoms sudaryti, analizę;
* pasiūlyti ir ištirti metodikas kraštinių sąlygų koeficientams rasti;
* atlikti skaičiavimus su skirtingomis pradinėmis ir kraštinėmis sąlygomis Šrodingerio uždaviniui;
* suformuluoti išvadas ir rekomendacijas kaip konstruoti sugeriančias kraštines sąlygas Šriodingerio lygčiai, nau-dojant šias metodikas.

• Uždaviniai, skirti trisluoksnei lygiagretinimo schemai:

* pasiūlyti trijų lygmenų lygiagretinimo metodiką;
* atlikti pasiūlytos schemos detalią analizę;
* pritaikyti sukurtą trisluoksnę schemą optimizavimo užda-viniams spręsti;
* suformuluoti išvadas ir rekomendacijas, kaip išnaudoti šios schemos visas galimybes.

## Tyrimo metodai

Disertacijoje taikomi šie metodai: diferencialinių lygčių sprendimo skaitiniai metodai (baigtinių tūrių metodas, baigtinių skirtumų metodas), algoritmų teorija, konvergavimo analizė, lygiagrečiųjų skai-čiavimų teorija, išplečiamumo analizė, srities dalijimo metodas, opti-mizavimo teorija ir simplekso metodas.

## Darbo mokslinis naujumas

• Disertacijoje nagrinėti ir lyginti lygiagretieji algoritmai, skirti skirtingiems naujausiems skaitiniams metodams, kurie literatūroje siūlomi uždaviniams su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu, spręsti. Atlikta lygiagrečiųjų algoritmų išplečiamumo ir kon-vergavimo analizė. Pateikta rekomendacijų, kaip pasiekti norimą tiks-lumą esant atitinkamam elipsinio operatoriaus trupmeniniam laipsniui .

• Pateikta rekomendacijų, kaip naudojant skirtingus metodus konstruoti sugeriančias kraštines sąlygas vienmatei Šriodingerio lygčiai. Pasiūlyta metodika parodė, kad galima rasti sugeriančias kraštines sąlygas keturiems kokybiškai skirtingiems uždaviniams.

• Pasiūlyta trijų lygmenų lygiagretinimo schema, kuri, lyginant su klasikine dvisluoksne lygiagretinimo schema, padidina naudotinų išteklių kiekį ir leidžia gauti papildomą pagreitėjimą. Parodyta, kad taikant siūlomą metodiką galima efektyviai išnaudoti esamus išteklius.

## Disertacijos praktinė vertė

* Sprendžiant nelokalųjį uždavinį su elipsiniu operatoriumi pakeltu trupmeniniu laipsniu skaičiavimo apimtys yra didelės, tad be lygiagrečiųjų skaičiavimų net ir vieną kartą išspręsti šį uždavinį yra sunku. Darbe atlikta lygiagrečiųjų algoritmų išplečiamumo analizė. Lyginti skirtingi metodai naudojant lygiagrečiuosius algoritmus. Pateiktos rekomendacijos, kaip pasiekti norimą tikslumą atitinkam elipsinio operatoriaus laipsniui , padeda pasirinkti tinkamą metodą.
* Pateikta trisluoksnė lygiagretinimo schema ir jos naudojimo reko-mendacijos. Ši schema gali būti efektyviai taikoma uždaviniams, kai naudotinų išteklių kiekis yra didelis.

## Ginamieji teiginiai

1. Nagrinėtais atvejais rekomenduojami, uždaviniams su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu, lygiagretieji algoritmai yra optimalūs skaičiavimų laiko atžvilgiu, norint pasiekti tam tikrą tikslumą prie duotųjų trupmeninių laipsnių.
2. Nurodytoje septynių parametrų erdvėje rastos pralaidžios kraš-tinės sąlygos keturiems kokybiškai skirtingiems Šriodingerio uždavi-niams.
3. Pateikta trisluoksnė lygiagretinimo schema padidina lygiagre-tumo laipsnį ir naudotinų resursų kiekį, todėl gauname papildomą pa-greitėjimą.

## Disertacijos rezultatų aprobavimas

Disertacijos rezultatai pristatyti penkiose tarptautinėse konfe-rencijose, trijose konferencijose, vykstančiose Lietuvoje, dviejose jaunųjų mokslininkų konferencijose ir Nesus organizuojamos žiemos mokyklos doktorantų simpoziume Zagrebe. Disertacijos tema pa-skelbti trys straipsniai, įtraukti į Thompson Reuters ISI Web of Scien-ce duomenų bazę ir turi citavimo indeksą, vienas straipsnis paskelbtas konferencijų medžiagoje. Detalus sąrašas pateiktas santraukos skyriuje „Publikacijų sąrašas“.

Disertacijos rezultatai pristatyti ir aptarti šiose konferencijose:

* MMA2019: 24nd International Conference, 2019 m. gegužės 28 d.–2019 m. gegužės 31 d., Talinas, Estija.
* DAMSS: 10th International Workshop on Data Analysis Me-thods for Software Systems, 2018 m. lapkričio 29 d.–2018 m. gruodžio 1 d., Druskininkai, Lietuva.
* DAMSS: 9th international Workshop on Data Analysis Methods for Software Systems, 2017 m. lapkričio 30 d.–2017 m. gruodžio 2 d., Druskininkai, Lietuva.
* MMA2018: 23nd International Conference, 2018 m. gegužės 29 d.–2018 m. birželio 1 d., Sigulda, Latvija.
* DAMSS: 8th Data Analysis Methods for Software Systems, 2016 m. gruodžio 1 d.–2016 m. gruodžio 3 d., Druskininkai, Lietuva.
* MMA2017: 22nd International Conference Mathematical Modelling and Analysis, 2017 m. gegužės 30 d.–2017 m. birželio 2 d., Druskininkai, Lietuva.
* 12th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics [PPAM 2017], 2017 m. rugsėjo 10 d.–2017 m. rugsėjo 13 d., Liublinas, Lenkija.
* MMA2016: 21st International Conference Mathematical Mo-delling and Analysis, 2016 m. birželio 1 d.–2016 m. birželio 4 d., Tartu, Estija.

Mokyklos:

* 3rd NESUS Winter School and PhD Symposium 2018, 2018 m. sausio 22 d.–2018 m. sausio 25 d., Zagrebas, Kroatija. Pranešimo te-ma: „Numerical analysis and optimization of parallel algorithms for problems with big computational costs.“ [http://nesusws.irb.hr/images/ Bookof\-Abstracts.pdf](http://nesusws.irb.hr/images/%20Bookof\-Abstracts.pdf)
* NESUS Winter School & PhD Symposium 2016, 2016 m. vasario 8 d.–2016 m. vasario 11 d., West University of Timisoara, Ru-munija.

Disertacijos rezultatai pristatyti Vilniaus universiteto Duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų institute ir Vilniaus Gedimino technikos universiteto matematinio modeliavimo katedroje.

## Disertacijos struktūra

Disertaciją sudaro įvadas, trys skyriai, literatūros sąrašas, publikacijų sąrašas, santrauka lietuvių kalba ir padėka. Disertacijos skyriai padalyti į poskyrius, o poskyriai – į skyrelius.

Disertacijoje yra 106 puslapiai, 10 paveikslų ir 30 lentelių. Disertacijoje cituojami 103 informacijos šaltiniai.

## Padėka

Esu dėkinga savo darbo vadovui prof. habil. dr. Raimondui Čiegiui už vadovavimą, konsultacijas, visapusę pagalbą ir palaikymą doktorantūros studijų metu. Jo dėka mano mokslinė kompetencija augo per visą studijų procesą. Tai ir yra pagrindinis doktorantūros studijų tikslas.

Dėkoju už pagalbą konsultantui prof. dr. Juliui Žilinskui. Taip pat dėkoju kolegoms už pagalbą atliekant tyrimus.

Esu dėkinga doc. dr. Teresei Leonavičienei ir prof. dr. Vadimui Starikovičiui už bendradarbiavimą atliekant tyrimus ir suteiktus patarimus.

Ypač norėčiau išskirtinai padėkoti kolegai dr. Andrejui Bugajevui už skirtą laiką, vertingas pastabas ir patarimus.

Dėkoju recenzentams prof. dr. Romui Baronui ir prof. habil. dr. Antanui Žilinskui už vertingas pastabas ir patarimus.

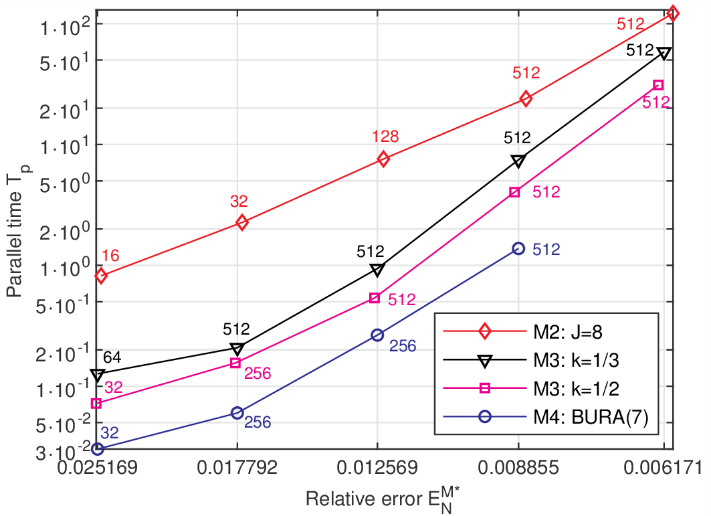
Dėkoju VU DMSTI globalaus optimizavimo grupės darbuotojams už vertingas pastabas. Taip pat VU DMSTI administracijos darbuotojams už pagalbą tvarkant dokumentus.

Esu dėkinga draugei dr. Kristinai Kaulakytei už pagalbą, palai-kymą ir vertingas pastabas.

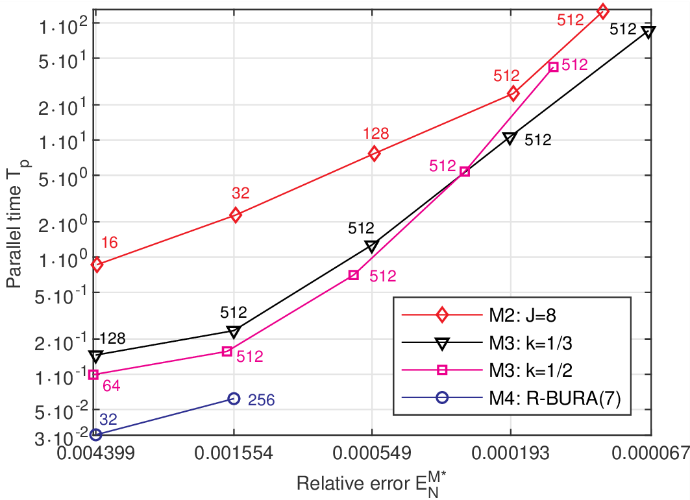
Nuoširdžiai dėkoju savo vyrui Gediminui, sūnums Arnui, Aivarui ir Benui už kantrybę, palaikymą ir supratingumą.

## Lygiagrečiųjų algoritmų sudarymas uždaviniams su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu

Antrajame disertacijos skyriuje nagrinėjamas uždavinys su elipsiniu operatoriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu. Pasirinkti keturi naujausi skaitiniai metodai, kurie nelokalųjį uždavinį transformuoja į pseudo-parabolinio ar elipsinio tipo lokalųjį diferencialinį uždavinį, suformuluotą didesnės dimensijos erdvėje, kai elipsinis operato-rius yra iš . Šių metodų ypatybės lemia skirtingas lygiagrečiųjų algoritmų savybes. Pasiūlyti lygiagretieji algoritmai grindžiami srities dekompozicijos ir šeimininko-darbininko metodais. Atlikta lygiagre-čiųjų algoritmų išplečiamumo ir konvergavimo analizė. Atlikti skai-čiavimo eksperimentai Bulgarijos mokslo akademijos informatikos ir komunikacijų technologijos instituto Sofijoje (angl. *Instituto Institute of Information and Communication Technologies (IICT) of the Bulga-rian Academy of Sciences*) klasteryje „Avitohol“ (http://www.iict. bas.bg/avitohol). Pateiktos išvados ir rekomendacijos, kaip pasiekti tam tikrą tikslumą atitinkamam trupmeniniam laipsniui (žr. Paveiks-las 11.1).



(a) Lygiagrečiojo sprendimo laikas su



(a) Lygiagrečiojo sprendimo laikas su

Paveikslas 11.1: Lygiagrečiųjų algoritmų palyginimas sprendžiant 3D testinį uždavinį (M1)–(M4) metodais.

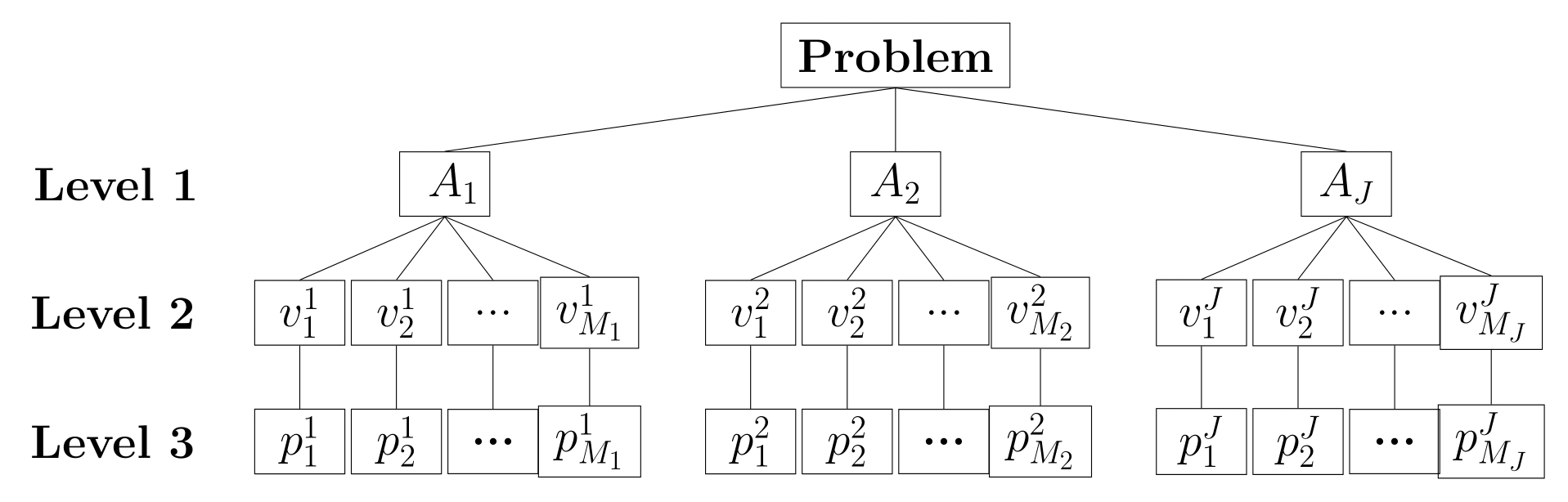
## Vienmatės Šriodingerio lygties pralaidžių kraštinių sąlygų sudarymas

Trečiajame disertacijos skyriuje nagrinėjama vienmatė tiesinė Šriodingerio lygtis. Sukonstruotos sugeriančios kraštinės sąlygos, kurios gaunamos aproksimuojant tikslias pralaidžias kraštines sąlygas racionaliosiomis funkcijomis. Rasti koeficientai pasirinktoms funkci-joms, ištirtos skirtingos strategijos koeficientams rasti: Padé aproksi-macija, Furjė simbolio aproksimacija normoje, atspindžio koefi-ciento minimizavimas normoje, du adaptyvūs metodai, paremti sprendinio paklaidų minimizavimu pasirinktiems uždaviniams su ži-nomais tiksliaisiais sprendiniais, ir kombinuotas metodas, paremtas kelių uždavinių su skirtingomis pradinėmis sąlygomis paklaidų mini-mizavimu, nagrinėtos dvi skirtingos normos. Suformuluotų globalaus optimizavimo uždavinių skaičiavimo sąnaudos yra didelės, todėl buvo naudojami lygiagretieji skaičiavimai. Atlikti skaičiavimo eksperimen-tai VU klasteryje „Saulėtekis“ (http://www.supercomputing.vu.lt/hpc-sauletekis). Pateikta skirtingų metodų lyginimo analizė ir rastas koefi-cientų rinkinys, kuris tinka dviem kokybiškai skirtingiems uždavi-niams, konstruojant sugeriančias kraštines sąlygas.

## Trisluoksnė lygiagretinimo schema

Ketvirtajame disertacijos skyriuje siūlome bendrą lygiagretinimo metodiką, skirtą optimizavimo uždaviniams spręsti, kai naudotinų išteklių skaičius yra didelis. Siūloma metodika turi tris lygiagretinimo lygmenis. Skirtingi lygiagretinimo lygmenys padidina lygiagretumo laipsnį, tačiau kelia naujų iššūkių. Pirmajame lygiagretinimo lygme-nyje darome prielaidą, kad egzistuoja lygiagrečiosios alternatyvos nuosekliajam algoritmui. Šis lygmuo tampa schemos lygiagrečiojo algoritmo dalimi, kurios lygiagretumo laipsnis gali būti pasirinktas dinamiškai skaičiavimų metu. Lygiagretinimo pagreitėjimas pirmajame lygmenyje nėra tiesinis, todėl gali sumažinti visos schemos lygiagretinimo efektyvumą . Tačiau šis lygmuo leidžia naudoti daug daugiau procesų ir greičiau išspręsti duotąjį uždavinį lyginant su dviejų lygmenų strategija. Atliekant schemos tyrimą, pirmajame lygmenyje kaip pavyzdį naudojome lygiagretųjį simplekso metodą. Antrajame schemos lygmenyje apibrėžiamas užduočių rinkinys su skirtingais skaičiavimo dydžiais. Kiekviena užduotis sudaryta iš darbų aibės. Darbų pasiskirstymas tarp užduočių gali būti nevienodas, dėl to lygiagretinimas sudėtingesnis ir kyla dar vieno lygmens poreikis, norint atlikti tinkamą darbų paskirstymą. Šiai problemai spręsti siūloma euristika, leidžianti paskirstyti užduotis tarp procesų. Kaip pavyzdys sprendžiamos diferencialinių lygčių. Šių uždavinių skaičiavimo dydžiai nevienodi, nes kiekvienai lygčiai diskretizuoti turi būti naudojamas skirtingas taškų skaičius pagal laiką ir erdvę, kad būtų pasiektas toks pat tikslumas. Trečiasis lygmuo skirtas lygiagre-čiajam algoritmui, kuriuo sprendžiame antrajame lygmenyje apibrėž-tas užduotis. Kaip pavyzdys naudojamas lygiagretusis Vango (Wang, 1981) algoritmas, skirtas triįstrižainėms lygčių sistemoms spręsti. Šis algoritmas yra sudėtingesnis už nuoseklųjį perkelties algoritmą, tačiau leidžia skirtingiems uždaviniams priskirti skirtingą procesorių skaičių. Šis lygmuo gali būti naudojamas be antrojo lygmens. Tada gauname dviejų lygių lygiagretinimo schemą, tačiau tokiu atveju trečiasis lygmuo ribojamas Amdahlo dėsnio. Pasiūlyta bendra metodika, kuri jungia lokalaus optimizavimo algoritmo lygiagretinimą su standarti-niu dviejų lygių lygiagretinimu.

Pateikta išsami pasiūlytos trijų lygmenų schemos analizė. Paro-dyta, kad siūloma metodika leidžia efektyviai išnaudoti esamus ištek-lius. Aptartos schemos taikymo galimybės. Atliktas dviejų lygiagre-čiųjų simplekso metodų lyginimas. Pateiktas schemos taikymo pavyz-dys, dėl kurio gautas geresnis trečiojo skyriaus rezultatas. Surastas ko-eficientų rinkinys tinkamas keturiems kokybiškai skirtingiems užda-viniams, t.y. apibrėžtos efektyvios sugeriančios kraštinės sąlygos. Tai pat šioje schemoje pasiūlyta euristika kontroliuoti efektyvumą trečia-jame lygmenyje. Atlikti skaičiavimo eksperimentai VU klasteryje „Saulėtekis“ (<http://www.supercomputing.vu.lt/hpcsauletekis>).



Paveikslas 13.1: Trijų lygmenų lygiagretinimo schema.

## Bendrosios išvados

1. Sukurti lygiagretieji algoritmai, uždaviniams su elipsiniu opera-toriumi, pakeltu trupmeniniu laipsniu, yra pakankamai efektyvūs (tam tikrais atvejais efektyvumas artimas 1). Didžiausio tikslumo spren-diniai gaunami naudojant eksponentiškai konverguojančią kvadratū-rinę formulę (M3).

2. Du metodai, kurie skirti racionaliosios funkcijos koeficientams surasti, t.y. Furjė simbolio aproksimacija ir atspindžio koeficiento minimizavimas, nėra universalūs. Pasirinktoje mažoje parametrų erdvėje rastas koeficientų rinkinys, tinkamas keturiems kokybiškai skirtingiems testuojamiems Šriodingerio uždaviniams, naudojant kombinuotą adaptyvų metodą, kai vertinamos skirtingų uždavinių pa-klaidos.

3. Pateikta trijų lygmenų lygiagretinimo schema, lyginant su klasikiniu dviejų lygmenų lygiagretinimo algoritmu, padidina ly-giagretumo laipsnį, o tai leidžia naudoti didesnį skaičiavimo išteklių kiekį (nagrinėtais atvejais apie 1,5 karto) ir gauti papildomą pagrei-tėjimą.

PUBLIKACIJŲ SĄRAŠAS

Straipsniai leidiniuose, įrašytuose į Mokslinės informacijos instituto (ISI) sąrašą

1. Čiegis, R.; Starikovičius, V.; Margenov, S.; Kriauzienė, R. Scalability analysis of different parallel solvers for 3D fractional power diffusion problems. *Concurrency and computation: practice and experience*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd. ISSN 1532-0626. eISSN 1532-0634. 2019, Vol. 31, iss. 19, p. e5163. DOI: 10.1002/cpe.5163.
2. Čiegis, R; Starikovičius, V; Margenov, S; Kriauzienė, R. Para-llel solvers for fractional power diffusion problems. *Concurrency and computation: practice and experience*. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd. ISSN 1532-0626. eISSN 1532-0634. 2017, Vol. 29, iss. 24, p. 1-12. DOI: 10.1002/cpe.4216.
3. Bugajev, A.; Čiegis, R.; Kriauzienė, R.; Leonavičienė, T.; Ži-linskas, J. On the accuracy of some absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation. *Mathematical modelling and analysis: the Baltic journal on mathematical applications, numerical analysis and differential equations*. Vilnius: Taylor & Francis, VGTU. ISSN 1392-6292. eISSN 1648-3510. 2017, Vol. 22, iss. 3, p. 408–423. DOI: 10.3846/13926292.2017.1306725.

Straipsnis konferencijų medžiagoje

1. Čiegis, R., Starikovičius, V., Margenov, S., Kriauzienė, R. 2018. A comparison of accuracy and efficiency of parallel solvers for fractional power diffusion problems. Parallel Processing and Applied Mathematics: 12th international conference, PPAM 2017, Lublin, Poland, September 10–13, 2017. Basel, Springer International Publishing, pp. 79-89, ISBN 9783319780238. DOI: 10.1007/978-3-319-78024-5\_8.

Knygos skyrius

1. Margenov, S; Rauber, Th.; Atanassov, E.; Almeida, F.; Blanco, V.; Čiegis, R.; Cabrera, A.; Frasheri, N.; Harizanov, S.; Kriauzienė, R.; Runger, R.; Segundo, P.S.; Starikovičius, V.; Szabo, S.; Zavalnij, B. Ultrascale Computing Systems. Applica-tions for ultrascale systems. Institution of Engineering and Tech-nology, 2019, p. 189-244. DOI: 10.1049/PBPC024E\h6. https:// digitalibrary.theiet.org/content/books/10.1049/pbpc024e\_ch6

Tezės konferencijų medžiagoje

1. Kriauzienė, R; Bugajev, A; Čiegis, R. The analysis and application of a three-level parallelisation scheme // Mathematical Modelling and Analysis [MMA2019]: 24rd international conference, May 28–May 31, 2019, Talinn,: abstracts.
2. Kriauzienė, R; Bugajev, A; Čiegis, R. A three-level parallelisation algorithm for optimisation problems // Mathematical Modelling and Analysis [MMA2018]: 23rd international conference, May 29–June 1, 2018, Sigulda, Latvia: abstracts. Riga: University of Latvia, 2018. ISBN 9789934195174. p. 41.
3. Kriauzienė, R; Bugajev, A.; Čiegis, R. Numerical analysis and optimization of parallel algorithms for problems with big computational costs // 3rd NESUS Winter School and PhD Symposium 2018, 22nd–25th January 2018, Zagreb, Croatia. Zagreb: Ruđer Bošković Institute. 2018, vol. 1, no. 1, p. 10.
4. Kriauzienė, R.; Bugajev, A.; Čiegis, R. Three level parallelisation scheme for optimisation problems involving simultaneous calculations of multiple differential equations // DAMSS 2018: 10th international workshop on „Data analysis methods for software systems“, Druskininkai, Lithuania, November 29–December 1, 2018 : [abstract book]. Vilnius: Vilnius University Press, 2018. ISBN 9786090700433. p. 48. DOI: 10.15388/DAMSS.2018.1.
5. Čiegis, R.; Starikovičius, V.; Margenov, S.; Kriauzienė, R. A comparison of accuracy and efficiency of parallel solvers for fractional power diffusion problems // PPAM 2017: 12th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, September 10–13, 2017, Lublin, Poland: book of abstracts. Czestochowa: Czestochowa University of Technology. 2017, p. 99.
6. Čiegis, R.; Starikovičius, V.; Margenov, S.; Kriauzienė, R. Lygiagrečiųjų skaitinių algoritmų, skirtų uždaviniams su elipsiniais operatoriais, pakeltais trupmeniniu laipsniu, analizė // Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai: 7-oji jaunųjų mokslininkų konferencija, 2017 m. vasario 9 d. Vilnius: Lietuvos mokslų akademijos leidykla. 2017, p. 56–57.
7. Starikovičius, V.; Čiegis, R.; Margenov, S.; Kriauzienė, R.. Parallel algorithms for the numerical solution of problems with fractional powers of elliptic operators // Mathematical Modelling and Analysis [MMA2017]: 22nd international conference, May 30–June 2, 2017, Druskininkai, Lithuania: abstracts. Vilnius: Technika, 2017. ISBN 9786094760228. eISBN 9786094760211. p. 64–65.
8. Kriauzienė, R.; Bugajev, A.; Čiegis, R. The new parallel multilevel tool for implementation of applied optimization algorithms // 9th International workshop on Data Analysis Me-thods for Software Systems (DAMSS), Druskininkai, Lithuania, November 30–December 2, 2017. Vilnius: Vilniaus University, 2017. ISBN 9789986680642. p. 28–29. DOI: 10.15388/DAMSS. 2017.
9. Bugajev, A.; Kriauzienė, R.; Čiegis, R. On the accuracy of some absorbing boundary conditions for the Schrodinger equation // Mathematical Modelling and Analysis (MMA2016): 21st inter-national conference, June 1–4, 2016 in Tartu, Estonia: abstracts // Institute of Mathematics and Statistics of the University of Tartu, European Consortium for Mathematics in Industry, Vilnius Gediminas Technical University, Estonian Mathematical Society. Tartu: University of Tartu, 2016. ISBN 9789949918096. p. 11.
10. Kriauzienė, R.; Bugajev, A.; Čiegis, R.; Leonavičienė, T.; Žilinskas, J.; Jankevičiūtė, G. Optimization of efficient absorbing boundary conditions for Schrödinger equation // Data analysis methods for software systems: 8th international workshop on data analysis methods for software systems, Druskininkai, December 1–3, 2016: [abstract]. Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 2016. ISBN 9789986680611. p. 30–31. DOI: 10.15388/DAMSS. 2016.

TRUMPOS ŽINIOS APIE DISERTANTĄ

Rima Kriauzienė Vilniaus pedagoginiame universitete (dabar VDU Švietimo akademija) įgijo matematikos bakalauro (2006 m.) ir matematikos magistro (2008 m.) laipsnius. 2015 – 2019 m. studijavo informatikos krypties doktorantūrą Vilniaus universiteto Duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų institute. Nuo 2012 m. dirba Vil-niaus Gedimino technikos universitete, matematinio modeliavimo katedroje. Moksliniai interesai: didelės skaičiavimo apimties skaitinių algoritmų analizė, optimizavimas.

Literatūros sąrašas

1. X. Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt, and A. Schädle. A review of transparent and artificial boundary conditions technique for linear and nonlinear Schrödinger equations. *Communications in Computational Physics*, 4(4):729–796, 2008.
2. A. Arnold. Numerically absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. *VLSI Design*, 6(1–4):313–319, 1998.
3. A. Bonito, J.P. Borthagaray, R. H. Nochetto, E. Ot´arola, and A. J. Salgado. Numerical methods for fractional diffusion. Computing and Visualization in Science, 19(5):19–46, 2018.
4. A. Bonito and J. P Pasciak. Numerical approximation of fractional powers of elliptic operator. *Mathematics of Computation*, 84, 2015.
5. S. Harizanov, R. Lazarov, P. Marinov, S. Margenov, and Y. Vutov. Optimal solvers for linear systems with fractional powers of sparse SPD matrices. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 25(5), 2018.
6. L. D. Menza. Transparent and absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation in a bounded domain. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, 18(7–8):759–775, 1997.
7. R. Nochetto, E. Otárola, and A. Salgado. A PDE approach to fractional diffusion in general domains: a priori error analysis. *Foundations of Computational Mathematics*, 15(3):733–791, 2015.
8. R. Nochetto, E. Otárola, and A. Salgado. A PDE approach to numerical fractional diffusion. In *Proceedings of the 8th ICIAM, Beijing, China*, pages 211–236, 2015.
9. J. Szeftel. Design of absorbing boundary conditions for Schrödinger equations in Rd. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 42(4):1527–1551, 2004.
10. P. Vabishchevich. Numerically solving an equation for fractional powers of elliptic operators. *Journal of Computational Physics*, 282:289–302, 2015.
11. H. Wang. A parallel method for tridiagonal equations. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 7(2):170–183, 1981.

Research Area and Relevance of the Problem

Nowadays, we need to solve problems with big computational costs, when we can not find a solution reasonably fast using a single core on the fastest computers. Another limitation of calculations is high me-mory requirements, that can not be fulfilled using a single shared me-mory computer. Thus, parallel computations are necessary.

In this dissertation, two problems are investigated. The first problem is described by fractional powers of elliptic operators (Nochetto et al., 2015; Bonito et al., 2018). This non-local problem has an important property: the increasment of the problem size greatly increases the numerical costs of computation. Parallel computing makes the appli-cation of such non-local models more feasible and attractive. Howe-ver, the efficient parallel computations require the application of a-ppropriate parallel algorithms and a detailed theoretical analysis. We investigate and compare the parallel numerical algorithms for different state-of-the-art (Nochetto et al., 2015; Vabishchevich, 2015; Bonito et al., 2018; Harizanov et al., 2018) numerical methods proposed to solve the non-local problems described by elliptic operators of fractional powers (Nochetto et al., 2015; Bonito et al., 2018). In this research, the non-local problem is transformed to some local (classi-cal) differential problem of elliptic or pseudo-parabolic type, formu-lated in a space of higher dimension , if . We investigate the weak and strong scalability of the developed parallel algorithms. Two- and three-dimensional test problems are solved and the results of extensive convergence tests are presented. The main aim of this part of dissertation is to determine, which parallel algorithms can be re-commended to achieve certain accuracy for the given fractional power coefficient.

The second non-local problem of this dissertation deals with the construction of absorbing boundary conditions for the one-dimension-

al Schrödinger equation (Menza, 1997; Arnold, 1998; Antoine et al., 2008; Szeftel, 2004). A simple standard boundary conditions are formulated on the boundaries of the restricted domain (e.g. the homogeneous Dirichlet boundary conditions), the solution after rea-ching the boundary will be reflected back into the domain and will pollute the results of subsequent simulations. Thus it is a challenge to construct appropriate local boundary conditions and to avoid the nega-tive long memory computational effects included into the definition of the exact non-local transparent boundary conditions. We are interested in methods based on the approximation of the exact transparent boun-dary conditions by rational functions. Different strategies are inves-tigated for the optimal selection of the coefficients of rational func-tions, including the Padé approximation, the norm approximations of the Fourier symbol, minimization of a reflection coefficient, techniques, based on minimization in two different norms for the chosen benchmark problems with known exact solutions and coupled adaptive strategy. The formulated minimization problems are consi-dered as black box problems of global optimization. Since the ob-jective functions of the attacked global optimization problems are computationally expensive, experiments take a considerable amount of time. Parallel computing should be applied to make experiments faster. The proposed minimisation technique showed that it is possible to find optimal values of coefficients that suit both test problems with the errors that are small enough for many modelling purposes.

We propose a general methodology for parallelisation of algorithms that address the considered problems. The optimization problems that are solved during the approximation of absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation fits this methodology very well. The strategy of parallelisation has three-levels. Different parallelisation levels of this scheme give new parallelisation possibilities; at the same time they also and create different computational challenges. The im-portant part of the proposed three-level scheme is based on a assump-

tion that there exists parallel alternatives to the original sequential optimization algorithm on the first level. The first level of paralleli-sation template becomes a part of a new parallel algorithm and the degree of the first level parallelism can be selected dynamically during the computations. The parallelisation technologies on the first level vary depending on a problem, there are no concrete methods that would work in all cases. However, we are presenting a general abstract procedure of application of this approach. On the second level, a set of computational tasks with different computational sizes is defined. These tasks can be solved independently, which means this part can be done in parallel. The third level is defined by parallel algorithms used to solve tasks from the second level. We optimise the workload distribution, for this purpose we propose a greedy workload balancing heuristic and test it on benchmark problems.

To show that these ideas work for a broad scope of applications, we discuss the possibility to apply the proposed three level parallelisation scheme to other examples.

The object of the thesis

The object of the thesis is to create and analyse efficient parallel algorithms for problems with big computational costs including optimization problems.

The Aim and Objectives of the Research

The aim of the research is to investigate efficient parallel algorithms for problems with the fractional powers of elliptic operators and optimization problems with big computational costs.

Thesis tasks are:

• Tasks for constructing parallel algorithms for problems with fractional powers of elliptic operators:

* the review the parallel algorithms for problems with fractional powers of elliptic operators;
* propose and analyse efficient parallel algorithms for problems with fractional powers of elliptic operators;
* perform scalability analysis of parallel algorithms;
* formulate conclusions and recommendations for problems with fractional powers of elliptic operators.

• Tasks for construction of absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation:

* to review of literature for constructing absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation;
* propose and investigate methods for finding coefficients for boundary conditions;
* perform calculations with different initial boundary con-ditions for the Schrödinger problem;
* formulate conclusions and recommendations for con-structing absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation using proposed methods.

• Tasks for three-level parallelisation scheme:

* propose a three-level parallelisation scheme;
* perform the detailed analysis of this scheme;
* apply the three-level scheme for optimization problems;
* formulate conclusions and recommendations for using all possibilities of this scheme.

Research Methodology

In the dissertation we use numerical schemes (finite volume method (FVM), the finite difference method (FDM)) from mathematical modelling theory, the methods of convergence analysis from the theory of algorithms, scalability analysis from the theory of parallel computing, multigrid, domain decompasition method, simplex method from the optimization theory.

Novelty of the Thesis

• In this dissertation, parallel algorithms for various most recent numerical methods for solving the fractional powers of elliptic operators problems were investigated and compared. Scalability and convergence analysis of parallel algorithms was performed. Recommendations to achieve a given accuracy for the provided fractional power coefficient were the specified.

• Recommendations to construct absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation using investigated methods were presented. The proposed methodology showed that it is possible to find the accurate absorbing boundary conditions for four qualitatively different problems.

• The proposed three-level parallelisation scheme comparing to the classical two level algorithm increases the amount of computational resources and lets us to achieve additional speed-up. It was shown, that the proposed methodology lets us use available resources efficiently.

Practical Value of the Research Findings

• The amount of calculations for solving a non-local problem with fractional power of elliptic operators are large and even a single solution of this problem without parallel calculations is difficult. In this dissertation, scalability analysis of parallel algorithms was performed. Different methods were compared using parallel algorithms. The recommendations to achieve a given accuracy for the provided fractional power coefficient help to select the appropriate method.

• The three-level parallelisation scheme and recommendations for usage of this scheme were proposed. This scheme can be applied to problems efficiently in the case when a big number of computational resources is available efficiently.

Defended Statements

1. For the given cases of test problems with fractional powers of elliptic operators the recommended parallel algorithms are optimal in terms of computational time in order to achieve certain accuracy for the provided fractional power coefficients.
2. Using the proposed methodology there were found absorbing boundary conditions for four qualitatively different tasks in a specified seven parameters space.
3. The proposed three-level scheme improves the degree of parallelism and improves the amount of available computational resources, which gave additional speed-up.

Presentation and Approbation of the Results

The results of this research were presented at five international and three national Lithuanian conferences, at the PhD Symposium 2018 of the 3rd NESUS Winter School. Three articles were published in periodical scientific publications in journals referred to ISI Web of science. One article was published in Conference Proceedings. The detailed list of publications can be found in the “List of Publications by the Author on the Topic of the Dissertation” theme.

Structure of the Dissertation and Main Results

The dissertation consists of Introduction, three chapters, conclusions and bibliography. The chapters are divided into sections, sections – into subsections. The scope of the dissertation is 106 pages including 10 figures and 30 tables. The list of references consists of 103 sources.

General Conclusions

• The proposed parallel algorithms for the problems of fractional powers of elliptic operators are efficient enough (in some cases, efficiency is close to 1). The highest accuracy solutions are obtained using the quadrature method (M3) with exponentially convergent quadrature formula.

• Two techniques to obtain coefficients of rational function, appro-ximation of the Fourier symbol and minimization of the reflection coefficient, are not universal. The appropriate set of coefficients for four qualitatively different testing Schrödinger problems in the selected seven parameters space was found using a coupled adaptive technique, when evaluating errors for different tasks.

• The proposed three-level parallel scheme was compared to the classical two-level parallel algorithm. The proposed parallel scheme improves the degree of parallelism and the additional degree of parallelism, this lets to use a bigger number of available computational resources (1.5 times more in the considered cases) and lets to achieve an additional speed-up.

Rima Kriauzienė

Didelės skaičiavimo apimties neklasikinių uždavinių sprendimo lygiagretieji algoritmai

Daktaro disertacijos santrauka

Gamtos mokslai

Informatika (N 009)

Redaktorė Jorūnė Rimeisytė – Nekrašienė

Rima Kriauzienė

Parallel algorithms for non-classical problems with big computational COSTS

Summary of a Doctoral Dissertation

Natural Sciences

Informatics (N 009)

Editor Zuzana Šiušaitė

Vilniaus universiteto leidykla

Universiteto g. 1, LT-01513 Vilnius

El. p. info@leidykla.vu.lt,

www.leidykla.vu.lt

Tiražas 30 egz.