КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

А.Н. НЕСТЕРЕНКО, В.В. ПОЛЯНКО, Т.О. ГЕРАСИМОВА

ПРОБЛЕМИ ЕФЕКТИВНОГО РОЗВ'ЯЗУВАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ НА БАГАТОЯДЕРНИХ КОМП'ЮТЕРАХ З ПРОЦЕСОРАМИ INTEL XEON PHI ДРУГОГО ПОКОЛІННЯ

Пропонується модифікований метод Ньютона та його алгоритм для розв'язування систем нелінійних рівнянь. Наведені результати експериментальних досліджень розробленого алгоритму на паралельному комп'ютері з процесорами Intel Xeon Phi другого покоління.

Вступ. Нагальною проблемою сучасної науки є знаходження розв'язків задач, пов'язаних з дослідження природних явищ, проектуванням та розрахунками поведінки об'єктів під впливом дії навколишнього середовища, проектуванням будівель та механізмів тощо. На практиці для розв'язування задач такого типу досить часто доводиться розв'язувати рівняння з частинними похідними. Для цього методом скінченних різниць або скінченних елементів їх зводять до систем нелінійних рівнянь (СНР) зі стрічковою матрицею Якобі (частіш за все блочно тридіагональною або блочно п'ятидіагональною). Часто ці розрахункові задачі мають дуже велику кількість рівнянь, тобто є системами високого порядку. Розрахунок таких задач на комп'ютерах вимагає відповідного зростання продуктивності комп'ютерів.

Традиційні паралельні комп'ютери, що налічують сотні і навіть тисячі процесорів (ядер), вже не задовольняють вимоги науковців. Але збільшення числа процесорів у паралельних комп'ютерах часто приводить до значного збільшення комунікаційних витрат і зниження їх ефективності.

Зростання продуктивності комп'ютерів досягається за рахунок використання суперкомп'ютерів принципово нової архітектури та розпаралелювання обчислень. До таких суперкомп'ютерів належать суперкомп'ютери, побудовані на багатоядерних процесорах Intel Xeon Phi, розроблених корпорацією Intel. Друге покоління процесорів Intel Xeon Phi x200

– це процесори-прискорювачі [1]. Вони можуть повністю замінити центральні процесори у паралельному комп'ютері.

Структура нових багатоядерних процесорів дає можливість використовувати багаторівневу модель паралельних обчислень. На верхньому рівні паралелізму є паралелізм рівня обчислювальних вузлів – паралельно виконуються підзадачі (макрооперації). Обчислення проводяться у вигляді паралельних процесів, передбачається використання розподіленої між паралельними процесами пам'яті, забезпечується синхронізація обчислень та обмін інформацією між процесами. На цьому рівні розпаралелювання між процесами доцільно здійснювати засобами MPI.

Розпаралелювання на другому рівні це паралелізм рівня потоків. На цьому рівні виконуються паралельні обчислення кожної з підзадач верхнього рівня паралелізму. Обчислення здійснюється на потоках вільних ядер з використанням спільної пам'яті за допомогою директив OpenMP (Open Multi-Processing) або програмних модулів бібліотеки Intel MKL.

Третій рівень паралелізму це паралелізм обробки даних векторними арифметико-логічними пристроями – автоматичне включення паралелізму в програму за допомогою компілятора.

Отже, враховуючи вищесказане, для розв'язання сучасних науково-технічних задач необхідно змінити підходи до створення паралельних алгоритмів. Якщо раніше необхідно було створювати паралельні алгоритми розв'язування задач на однотипних процесорах, то нині при розробці паралельних алгоритмів необхідно враховувати різні архітектури обчислювальних ресурсів, щоб алгоритми були ефективними і давали можливість якнайшвидше отримати розв'язок задач та оптимізувати комунікаційні витрати.

Розглянемо розробки алгоритмів і програм та організації обчислень при розв'язуванні СНР на паралельних комп'ютерах з багатоядерними процесорами Intel Xeon Phi x200.

Постановка задачі з наближеними вихідними даними для систем нелінійних рівнянь. Нехай дана система n нелінійних рівнянь:

$$f(x) = 0\,, \tag{1}$$

де $f(x) = \left(f_1(x),\ \ f_2(x), \ldots, f(x)\right)^T$ – n-вимірна вектор-функція, а $x = \left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right)^T$ – n-вимірний вектор, причому $f(x) = 0$ є якимось наближенням до точної системи нелінійних рівнянь $\varphi(y) = 0$, і для цих вектор-функцій виконується нерівність

$$\left\| f(u) - \varphi(u) \right\| \le \delta, \qquad (2)$$

на будь-якому n-вимірному векторі u. Для розв'язування задачі (1) задаються початкове наближення x_0, область $D = \{a^i \le x^i \le b^i \quad (i = 1, 2, \dots, n)\}$, в якій шукається розв'язок, і необхідна точність ε отримання наближення до розв'язку системи. При цьому початкове наближення належить визначеній області $x_0 \in D$. Верхнім індексом у формулах позначені номери компонент векторів, а нижнім – номери ітерацій.

Якщо $H = \left\{ \dfrac{\partial f^i}{\partial x^j} \right\}_{i,j=1}^{n}$ – матриця Якобі системи (1) (або деяке наближення до неї), то ітераційний процес методу Ньютона знаходження розв'язку при заданому початковому наближенні можна записати у вигляді

$$H_k w_k = -f(x_k), \qquad (3)$$

де $w_k = x_{k+1} - x_k$ – поправка, k = 0, 1 ... – номер ітерації, і $x_k = x_k + w_k$. Як видно з формули (3), на кожній ітерації необхідно розв'язувати систему лінійних алгебраїчних рівнянь, обчислюючи значення вектор-функції і матрицю Якобі.

У випадку стрічкової матриці Якобі матриця представляється в блочному вигляді:

$$H(x) = \begin{bmatrix} H^{11} & H^{12} & 0 & \dots & 0 \\ H^{21} & H^{22} & H^{23} & \dots & 0 \\ 0 & H^{31} & H^{33} & \cdots & 0 \\ \dots & & & \ddots & \\ 0 & \dots & & H^{p-1,p} & H^{pp} \end{bmatrix}.$$

Відповідно з представленням матриці Якобі в блочному вигляді представляються вектор правої частини та вектор невідомих:

$$f(x) = \begin{bmatrix} f^1 \\ f^2 \\ \vdots \\ f^p \end{bmatrix}, \qquad x_k = \begin{bmatrix} x_k^1 \\ x_k^2 \\ \vdots \\ x_k^p \end{bmatrix}.$$

Модифікований метод Ньютона можна записати у наступному вигляді:

$$
\begin{aligned}
&H^{11}\left(x_{k+1}^{1}-x_{k}^{1}\right)+f^{1}\left(x_{k}\right)+H^{12}(x_{k}^{2}-x_{k-1}^{2})=0,\\
&H^{22}\left(x_{k+1}^{2}-x_{k}^{2}\right)+f^{2}\left(x_{k}\right)+H^{21}\left(x_{k}^{1}-x_{k-1}^{1}\right)+H^{23}(x_{k}^{3}-x_{k-1}^{3})=0,\\
&\ldots\\
&H^{ii}\left(x_{k+1}^{i}-x_{k}^{i}\right)+f^{i}\left(x_{k}\right)+\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{p}H^{ij}\left(x_{k}^{j}-x_{k-1}^{j}\right)=0,\\
&\ldots\\
&H^{pp}\left(x_{k+1}^{p}-x_{k}^{p}\right)+f^{p}\left(x_{k}\right)+H^{p-1,p}\left(x_{k}^{p-1}-x_{k-1}^{p-1}\right)=0.
\end{aligned}
\tag{4}
$$

При цьому наступне наближення обчислюється за формулами:

$$
\begin{aligned}
&x_{k+1}^{1}=x_{k}^{1}-H^{11^{-1}}\left(f^{1}\left(x_{k}\right)+H^{12}(x_{k}^{2}-x_{k-1}^{2})\right),\\
&x_{k+1}^{2}=x_{k}^{2}-H^{22^{-1}}\left(f^{2}\left(x_{k}\right)+H^{21}\left(x_{k}^{1}-x_{k-1}^{1}\right)+H^{23}(x_{k}^{3}-x_{k-1}^{3})\right),\\
&\ldots\\
&x_{k+1}^{i}=x_{k}^{i}-H^{ii^{-1}}\left(f^{i}\left(x_{k}\right)+\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{p}H^{ij}\left(x_{k}^{j}-x_{k-1}^{j}\right)\right),\\
&\ldots\\
&x_{k+1}^{p}=x_{k}^{p}-H^{pp-1}\left(f^{p}\left(x_{k}\right)+H^{p-1,p}\left(x_{k}^{p-1}-x_{k-1}^{p-1}\right)\right).
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Якщо позначити в загальному вигляді матрицю G:

$$
\begin{aligned}
&G^{11}=\left[0,H^{1,2}\right],\\
&G^{ii}=\left[H^{i,i-1},0,H^{i,i+1}\right],\quad i=2,3,\ldots,p-1,\\
&G^{pp}=\left[H^{p,p-1},0\right],
\end{aligned}
$$

то для збіжності ітераційного процесу, тобто для того, щоб поправка прямувала до нуля, необхідно виконання нерівності:

$$\max_{1\le i\le p}\left\|H^{ii^{-1}}G^{ii}\right\|<1.$$

Паралельний алгоритм методу Ньютона. На верхньому рівні паралелізму паралельний алгоритм наведеного методу реалізується в середовищі MPI з розподіленою пам’яттю на p процесах за такою обчислюваною схемою.

1. Виходячи з рівномірного завантаження процесів, здійснюється автоматичний розподіл обчислення значень компонент n-вимірної вектор-функції системи нелінійних рівнянь на p блоків, (p – кількість MPI процесів) [2, 3].

2. У кожному з p процесорних елементів обчислюються по m компонент вектор-функції $f(x_0)$.

3. У кожному з p процесорних елементів обчислюється відповідний діагональний блок матриці Якобі $H^{ii}(x_0)$ розміру $m \times m$.

4. Для модифікованого методу Ньютона замість СЛАР, заданих формулою (3), розв'язується СЛАР, що задана формулою (4), відносно похибки $w_k = x_{k+1} - x_k$ з використанням, наприклад, паралельного варіанта методу Гаусса.

5. Обчислюються відповідні компоненти наступного наближення до розв'язку x_{k+1} за формулами (5). Потім у кожному з p процесів збираються отримані частини компонент вектора наближеного розв'язку, обчислюються компоненти вектор-функції $f(x_{k+1})$ і перевіряються умови закінчення ітераційного процесу. Обмін даними між процесами відбувається за стандартами MPI [4].

6. Обчислення похибки отриманого наближення розв'язку системи з наближеними даними відносно точного розв'язку системи з точними даними [5] здійснюється за формулою:

$$\| x_k - x \| \le \varepsilon + \| H_k^{-1} \| \delta,$$

де x – точний розв'язок точної системи рівнянь. Зауважимо, що у кожному з p процесів обчислюються відповідні блоки матриці Якобі H_k та обернені до них H_k^{-1}.

Оскільки для кожного з MPI-процесів підзадачі 2 – 6 – виконуються однорідні операції над великим обсягом даних, то наступний крок розпаралелювання реалізовано в середовищі OpenMP [6]. Це другий рівень паралелізму – рівень паралелізму потоків. Тут кожна з підзадач 1 – 6 верхнього рівня паралелізму розпаралелюється між деякою кількістю потоків (*threads*) на вільних ядрах з використанням спільної пам'яті.

На третьому рівні паралелізму є паралелізм обробки даних – здійснюється автоматична векторизація циклів за рахунок використання векторних процесорних пристроїв (VPU).

Порівняння звичайного та модифікованого методів Ньютона. Далі наведено порівняння часів розв'язку системи нелінійних рівнянь із стрічковою матрицею Якобі звичайним та модифікованим методами на паралельному комп'ютері, що має наступні характеристики:

- процесори: Intel Xeon Phi 7210 (64 ядра) з частотою 1.3 ГГц;
- обсяг швидкої пам'яті MCDRAM: 16 Гб;
- обсяг оперативної пам'яті: 192 Гб;
- обсяг SSD накопичувача: 240Гб.

У наведеній далі табл. 1 представлені часи розв'язування системи нелінійних рівнянь:

$$(3-2x^i)x^i - 2x^{i+1} + 1 = 0, \qquad i = 0,$$

$$(3-2x^i)x^i - 2x^{i+1} - x^{i-1} + 1 = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n-2,$$

$$(3-2x^i)x^i - x^{i-1} + 1 = 0, \qquad i = n-1,$$

починаючи з початкового наближення $x^i = -1$ в області $D = \{a^i \le x^i \le b^i\}$, $i = 0, 1, 2, \ldots, n-1$, при n = 10 000, *it* = 100, *eps* = 1×10^{-10}, *del* = 1×10^{-10}, a^i = –1000, b^i = 1000. У першому стовпчику подані часи розв'язування нелінійної системи модифікованим методом Ньютона з використанням багаторівневого паралелізму, тобто, *p*-MPI процесів на верхньому рівні паралелізму, *p_threads* тредів для директив OpenMP на другому рівні паралелізму та автоматична векторизація циклів за рахунок використання векторних процесорних пристроїв на третьому рівні паралелізму. Зауважимо, що для цього стовпчика наведено результати, отримані для кількості тредів, що обчислюються як *p_threads* = 64/ *p*. У другому стовпчику наведено часи розв'язування СНР модифікованим методом Ньютона з використанням *p* MPI процесів, а у третьому – часи розв'язування СНР звичайним методом Ньютона з використанням *p* MPI процесів.

ТАБЛИЦЯ 1. Часи розв'язування СНР

p	Модифікований метод Ньютона з використанням багаторівневого паралелізму	Модифікований метод Ньютона	Звичайний метод Ньютона
1	215,44	8581,55	7732,35
8	7,69	47,37	1000,00
16	1,75	6,87	528,11
32	0,28	0,73	407,32
64	0,091	0,13	214,95
128	0,08	0,083	241,07
256	0,19	0,18	299,33

З табл. 1 видно, що програмна реалізація запропонованого алгоритму суттєво скорочує час розв'язування задачі. Слід також зауважити, що для кожної задачі оптимальна кількість процесів різна. З таблиці видно, що оптимальна кількість процесорів для розв'язування цієї задачі знаходиться десь між 128 і 256.

Коефіцієнт прискорення для даної СНР 10 000 порядку наведені в табл. 2.

ТАБЛИЦЯ 2. Коефіцієнт прискорення

p	Модифікований метод Ньютона з використанням багаторівневого паралелізму	Модифікований метод Ньютона	Звичайний метод Ньютона
8	716,73	181,16	7,73
16	3113,93	1249,13	14,64
32	19684,46	11755,54	18,98
64	60567,58	66011,92	35,97
128	68895,625	103392,16	32,07
256	29008,68	47675,27	25,83

Отже, з таблиці видно, що із збільшенням кількості процесів та використанням багаторівневого паралелізму для знаходження розв'язку СНР, коефіцієнт прискорення збільшується.

На графіку (рисунок) показані часи (у секундах) розв'язування вищенаведеної системи нелінійних рівнянь при n = 20000, 30000, 40000 та 50000 модифікованим методом Ньютона з використанням багаторівневого паралелізму на кількості процесів від 32 до 256.

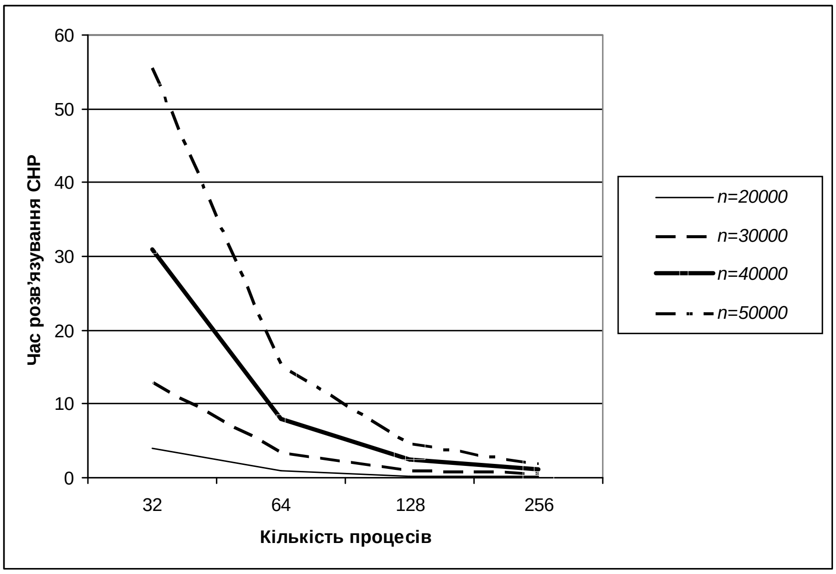

РИСУНОК. Часи розв'язування СНР різних порядків

Із збільшенням порядку системи швидкість зменшення часу розв'язування від кількості процесів суттєво зростає.

Висновки. Модифікований метод Ньютона скорочує час розв'язування задачі та вимагає меншого обсягу пам'яті, що дає можливість розв'язувати СНР більш високих порядків. Із збільшенням кількості процесів, використаних для знаходження розв'язку задачі, коефіцієнт прискорення збільшується. Модифікований метод легко масштабується на різну кількість процесів. Крім того, при використанні багаторівневого паралелізму можна розробити ефективні алгоритми розв'язуванні СНР на паралельних комп'ютерах з процесорами Intel Xeon Phi другого покоління. При цьому час розв'язування задач суттєво скорочується.

А.Н. Нестеренко, В.В. Полянко, Т.А. Герасимова

НЕКОТОРЫЕ ПОДХОДЫ К РАЗРАБОТКЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА КОМПЬЮТЕРАХ С ПРОЦЕССОРАМИ INTEL XEON PHI

Предлагается модифицированный метод Ньютона и его алгоритм для решения систем нелинейных уравнений. Приведены результаты экспериментальных исследований разработанного алгоритма на параллельном компьютере с процессорами Intel Xeon Phi второго поколения.

A.N. Nesterenko, V.V. Polyanko, T.O. Gerasimova

APPROACHES TO DEVELOPMENT OF PARALLEL ALGORITHMS FOR SOLVING PROBLEMS ON COMPUTERS WITH INTEL XEON PHI PROCESSORS

A modified Newton method and its algorithm for solving systems of nonlinear equations are proposed. The results of experimental studies of the developed algorithm on a parallel computer with Intel Xeon Phi processors of the second generation are presented.

Список літератури

1. https://www.ixbt.com/news/2016/06/21/xeon-phi-knights-landing.html
2. Нестеренко А.Н., Химич А.Н., Яковлев М.Ф. Некоторые вопросы решения систем нелинейных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью. *Вестник компьютерных и информационных технологий.* М.: 2006. № 10. С. 54 – 56.
3. Яковлев М.Ф., Герасимова Т.О., Нестеренко А.Н. Особливості розв'язування систем нелінійних та диференціальних рівнянь на паралельних комп'ютерах. *Питання оптимізації обчислень (ПОО – XXXV)*. Праці міжнародного симпозіуму. Київ: Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України. 2009. Т. 2. С. 435 – 439.
4. MPI. http://www.mpi.org
5. Химич А.Н., Яковлев М.Ф., Герасимова Т.А. Некоторые вопросы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на MIMD-компьютерах. *Кибернетика и системный анализ.* 2007. № 2. С. 175 – 182.
6. https://www.openmp.org/

Одержано 07.08.2018

Про авторів:

Нестеренко Алла Никифорівна,
молодший науковий співробітник Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України,

Полянко Віктор Володимирович,
кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України,

Герасимова Тетяна Олексіївна,
молодший науковий співробітник Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України.