О.М. Хіміч, О.А. Ніколаєвська, Т.В. Чистякова

ПРО ДЕЯКІ СПОСОБИ ПІДВИЩЕННЯ ТОЧНОСТІ КОМП'ЮТЕРНИХ ОБЧИСЛЕНЬ

Анотація. Досліджуються різні способи використання багаторозрядної комп'ютерної арифметики. Наведено результати реалізації паралельного алгоритму сингулярного розвинення матриці з підвищеною точністю за допомогою функцій бібліотеки GMP на MIMD-комп'ютері.

Ключові слова: паралельний алгоритм *SVD*-розвинення, підвищена розрядність, бібліотека GMP.

1. Вступ.

Одним з найважливіших напрямків використання комп'ютерів, які забезпечують науково-технічний прогрес, є їх застосування для комп'ютерного моделювання процесів, більшість з яких зводиться або мають своїм проміжним етапом розв'язування задач обчислювальної математики. Відомо, що незважаючи на досить повне теоретичне обґрунтування методів розв'язування цих задач, в ряді випадків отримують комп'ютерні розв'язки, що не мають фізичного сенсу. Проблеми достовірності комп'ютерних розв'язків задач знаходяться у центрі уваги багатьох спеціалістів з часів розробки перших комп'ютерів та прикладного програмного забезпечення [1-6].

Причин цього є декілька. По-перше, існуюче чисельне програмне забезпечення створювалося з припущенням того, що вихідні дані задані точно, а дослідження достовірності комп'ютерних результатів здебільшого покладається на користувачів, які розв'язують свої практичні задачі. Але при розв'язуванні прикладних задач їхні математичні моделі мають, як правило, наближені дані та похибки, пов'язані з обмеженою розрядністю чисел, що зберігаються в пам'яті комп'ютера, і в результаті заокруглень під час виконання арифметичних операцій.

Слід також зазначити, що методи класичної математики можуть бути непридатні для комп'ютерної реалізації. Так, наприклад, класичні методи визначення такого фундаментального поняття лінійної алгебри як ранг матриці непридатні з обчислювальної точки зору для реалізації з обмеженою розрядністю обчислень. У цьому випадку слід використовувати визначення рангу матриці, яка враховує наближений характер машинних моделей задач [5], а для його обчислення – стійкі з обчислювальної точки зору алгоритми, зокрема алгоритм сингулярного розвинення матриць.

Інший приклад пов'язаний з виродженістю матриць. Реалізація класичного визначення виродженності матриці – рівність нулю її визначника – в комп'ютерній арифметиці очевидно є неприйнятною (величезний обсяг комп'ютерних обчислень для матриць, які виникають на практиці призводить до неправильних результатів через похибки обчислень). У цьому випадку доцільно перевіряти матрицю на виродженність в межах машинної точності, використовуючи в арифметиці з плаваючою комою співвідношення

$$1.0 + r(condA) = 1.0\,, \tag{1}$$

де $r(condA) = 1/condA$, $condA$ – оцінка числа обумовленості матриці [5, 6]. Виконання цієї умови, яка виконується в арифметиці з плаваючою точкою, означає, що матриця має повний ранг у межах машинної точності. Для забезпечення достатньої точності обчислень необхідно продовжити дослідження з використанням підвищеної розрядності обчислень.

Отже, однією з актуальних проблем отримання достовірних комп'ютерних результатів математичного моделювання є створення засобів розв'язування задач з довільною комп'ютерною розрядністю.

2. Деякі засоби реалізації високоточної арифметики. Проблеми підвищення точності комп'ютерних обчислень стали досліджувати ще в середині минулого століття. В Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова в 1965 році вперше в світі на комп'ютерах серії МІР було реалізовано виконання обчислень з довільною розрядністю. Причому оператор «розрядність» можна було використовувати в будь-якому місці програми [7].

З появою комп'ютерів паралельних архітектур стало можливим розв'язувати задачі математичного моделювання надвеликих розмірів і проблеми використання підвищеної комп'ютерної розрядності стали дуже актуальними.

У серпні 2008 року в напрямку підвищення розрядності обчислень був зроблений важливий крок, пов'язаний з публікацією стандарту IEEE 754-2008, який замінив раніше діючий стандарт обчислень з плаваючою комою IEEE 754-1985. Стандарт 1985 року передбачав 2 типи чисел з плаваючою комою: одинарної (32-розрядні) і подвійної (64-розрядні) точності. У стандарті IEEE 754-2008 однією з перших апаратних реалізацій став арифметичний співпроцесор Intel 8087, в якому додатково використовується внутрішній «розширений» 80-розрядний формат з 64-розрядною мантисою. Це спонукало до створення апаратних та програмних засобів для реалізації обчислень з підвищеною точністю [8].

Наведемо декілька доступних у наш час пакетів для високоточної арифметики з плаваючою комою:

- ARPREC: підтримує довільну розрядність, з безліччю алгебраїчних та трансцендентних функцій C++ та Fortran-90 [8].
- GMP: підтримує високоточні обчислення з плаваючою комою для цілих та раціональних чисел, розповсюджується під ліцензією GNU на Free Software Foundation [9].
- MPFR [10]: підтримує підвищену точність обчислень з плаваючою комою з правильним закругленням на основі GMP.
- MPACK: бібліотека програм для реалізації обчислень лінійної алгебри з довільною розрядністю до складу якої входять бібліотеки MBLAS та MLAPACK, створені на основі версій BLAS та LAPACK, відповідно [11].
- Matlab, Maple [12,13]: пакети програм математичних обчислень, які реалізують символьну арифметику, забезпечують обчислення з довільною розрядністю за допомогою функцій MPFR та GMP.

В Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова також проводяться роботи по створенню засобів розв'язування задач з довільною розрядністю на комп'ютерах різних архітектур. Так, для розв'язування задач з підвищеною точністю розроблено комп'ютерні засоби на базі ПЛІС [14], які реалізують як двійкову, так і десяткову арифметику. При цьому розрядність даних може бути 128 біт і більше. Також створено бібліотеку програм для розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь зі щільними матрицями з довільною розрядністю для однопроцесорних та паралельних комп'ютерів [15]. Для покращення продуктивності двоключової криптографії створено швидкі алгоритми множення багаторозрядних чисел [16].

3. Реалізація паралельного алгоритму сингулярного розвинення матриці з підвищеною точністю. Розглянемо розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) $Ax = b$, де $A = (a_{ij})$, $i, j = 1 \div n$, $n = 3w + 1$, $w = 1, 2, \ldots;$

$$a_{ii} = n - i, \quad a_{ij} = n + 1 - \max(i, j), \; n = 1000.$$

Тобто щільна симетрична матриця A має вигляд:

$$A = \begin{pmatrix} n-1 & n-1 & n-2 & \ldots & 2 & 1 \\ n-1 & n-2 & n-2 & \ldots & 2 & 1 \\ n-2 & n-2 & n-3 & \ldots & 2 & 1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 2 & 2 & 2 & \ldots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \ldots & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

Елементи правої частини системи обчислюються за формулами:

$b = \{b\}_1^n$, $b_i = n - i$, якщо $i \le 2$; $b_i = n + 1 - i$, якщо $i > 2$.

Точний розв’язок системи: $x = (0, \ 1, \ 0, \ \ldots, \ 0)^T$.

Експериментальне дослідження створеного алгоритму проводились на інтелектуальній робочій станції Інпарком-256 [6]. Для знаходження узагальненого розв’язку системи було використано паралельний алгоритм сингулярного розвинення матриці (*SVD*-розвинення) [6] з використанням подвійної розрядності та розрядності 128 (за допомогою функцій GMP). *SVD*-розвинення матриці A реалізується за формулою $A = U\Sigma V^T$ за допомогою послідовних двосторонніх ортогональних перетворень Хаусхолдера та *QR*-алгоритму з неявними зрушеннями. Узагальнений розв’язок отримується за допомогою пертворень: $x^{\#} = V(\Sigma^{\#} c)$, $c = U^T b$, де $\Sigma^{\#}$ – псевдообернена матриця сингулярних чисел.

Нижче наведено фрагмент протоколу розв’язування задачі на різній розрядності:

```
D a t a :
 - number of matrix's rows        = 1000
 - number of matrix's columns     = 1000
 - number of the right-hand side = 1

Method singular value decomposition of a general matrix

    Double precision

The first 12 components of solution (vector 1) are:
5.6333892e-10 1.0000000e+00  9.4955344e-10 -3.9295606e-10
3.4584592e-11 -3.1325660e-11 -5.2191194e-11 1.0333934e-10
4.0820428e-11 1.2171034e-10 -1.3408585e-10 -1.3067941e-10

Error estimations:   4.99145e-08

 Number of processors: 256
 Time of the problem solving: 1.90184e+00

     P r e c i s i o n :  1 2 8

The first 12 components of solution (vector 1) are:

      4.542023653172171029613412372708540734237e-10
      9.999999988133053712363884862610545339883e-1
      8.596337855248521920949042511303410682999e-10
     -5.778745545522837613719304657057155162560e-10
      2.478842441000457028969062655076884178892e-10
     -4.614732005746163711772859280407039572994e-11
```

```
    -1.332058817740914894055177822937008106361e-10
    2.475147353295835911231063091604476666731e-10
    -1.413511305470471351429083270818254995334e-10
    4.646294881316116625025682001215166728271e-11
    1.579344790735691761620889129173387714917e-10
    -1.321933565365172523005909115249671919661e-10

Error estimations:   4.99145e-08

Number of processors: 256
Time of the problem solving: 1.30108e+10
```

З лістингу ми бачимо, що використовуючи розрядність 128 одержано розв'язок з більшою точністю ніж з використанням подвійної розрядності, але час розв'язування задачі при цьому значно збільшився.

На рис. 1 показано як змінюється час розв'язування СЛАР різного порядку паралельним алгоритмом *SVD*-розвинення з різною розрядністю, використовуючи на 256 процесах.

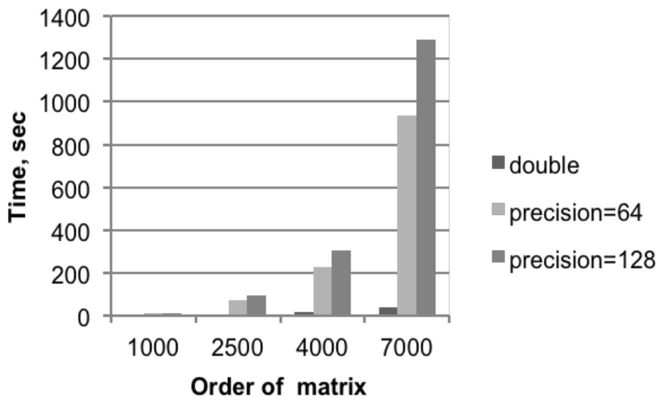

Рис. 1. Залежність часу розв'язування задач від розрядності

Висновки. Досвід використання різних способів реалізації обчислень з підвищеною розрядністю показав:

1). Для забезпечення достовірності результатів розв'язування погано обумовлених систем доцільно використовувати підвищену розрядність.

2). Реалізація обчислень за допомогою апаратних засобів потребує суттєвих фінансових затрат на придбання необхідних серверів, а реалізація обчислень з підвищеною точністю за допомогою програмних засобів значно збільшує час розв'язування задачі. Отже, необхідно виконувати обчислення з підвищеною розрядністю лише для задач, які потребують уточнення результатів розв'язування (можливо застосовувати змінну розрядність).

3). Для платформи UNIX / Linux найбільш популярною бібліотекою для реалізації обчислень з підвищеною точністю є бібліотека GMP.

4). В Інституті кібернетики створено бібліотеку програм для розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь зі щільними матрицями з довільною розрядністю для однопроцесорних та паралельних комп'ютерів. Проводяться роботи по розширенню цієї бібліотеки програмами для розріджених матриць.

Список використаних джерел:

1. Райс Дж. Матричные вычисления и математическое обеспечение / Райс Дж. – М.: Мир, 1984. – 264 с.
2. Уилкинсон Дж.Х. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра / Уилкинсон Дж.Х., Райнш К. – М.: Машиностроение, 1976. – 389 с.
3. Воеводин В.В. Ошибки округлений и устойчивость в прямых методах линейной алгебры / Воеводин В.В. – М.: ВЦ МГУ, 1969. – 153 с.
4. Форсайт Дж. Машинные методы математических вычислений / Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. – М.: Мир, 1980. – 279 с.
5. Молчанов. И.Н. Машинные методы решения прикладных задач. Алгебра, приближение функций, обыкновенные дифференциальные уравнения. – Киев: Наук. думка, 2007. – 550 с.
6. Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов О.В. и др. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. / К.: Наук. думка, 2008. – 247 с.
7. Глушков В.М. Программное обеспечение ЭВМ МИР-1 и МИР-2. Численные методы / В.М. Глушков, И.Н. Молчанов, Б.Н. Брусникин и др.- Киев: Наук. думка, 1976. – Т. 1. – 280 с.
8. Bailey, D. H.; Hida, Y.; Li, Y.; Thompson, B. ARPREC: An arbitrary precision computation package, 2002. http://www.davidhbailey.com/dhbpapers/arprec.pdf http://crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/mpdist
9. The GNU multiple precision library. https://gmplib.org
10. The GNU MPFR Library. http://www.mpfr.org
11. MPACK. Multiple precision arithmetic BLAS (MBLAS) and LAPACK (Mlapack). http://mplapack.sourceforge.net/

12. Matlab Multiple precision arithmetic. http://www.advanpix.com/documentation/users-manual/
13. Maple soft. https://www.maplesoft.com/products/maple/
14. Опанасенко В.М., Хіміч О.М. Лісовий О.М., Чистякова Т.В. Розв’язання задач с підвищеною точністю обчислень. // Управляющие системы и машины, № 1, 2011. – С. 9 – 18.
15. Khimich A., Nikolaevskaya E., Chistyakova T. Programming with Multiple Precision. / Springer-Verlag. Berlin, 2012. – 206 p.
16. Задірака В.К., Олексюк О.С. Комп’ютерна арифметика багаторозрядних чисел. Наукове видання. – К., 2003. – 264 с.