О.М. Хіміч, О.В. Чистяков

ГІБРИДНИЙ АЛГОРИТМ МЕТОДУ ІТЕРАЦІЙ НА ПІДПРОСТОРІ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ СТІЙКОСТІ КОНСТРУКЦІЙ

1. Вступ. В наш час в сфері високопродуктивних обчислень широкого застосування набувають гібридні комп'ютери, архітектура яких поєднує багатоядерні процесори (CPU) з розподіленою пам'яттю та масивно-паралельні прискорювачі обчислень − графічні процесори (GPU).

Велика кількість наукових та практичних задач, зокрема, при дослідженні стійкості конструкцій, розрахунку динаміки напружено-деформованого стану об'єктів різної природи та ін., зводяться до розв'язання часткової алгебраїчної проблеми власних значень стрічкових симетричних додатно-означених матриць великої розмірності. Застосування гібридних комп'ютерів для розв'язування таких задач потребує створення алгоритмів, які враховують унікальні архітектурні та обчислювальні особливості цих комп'ютерів.

2. Гібридний алгоритм методу ітерацій на підпросторі для стрічкових матриць. Розглядається алгебраїчна проблема власних значень (АПВЗ) для стрічкових симетричних додатно-означених матриць:

$$Ax = \lambda Bx, \quad A, B \in M^{n\times n}, \quad x \in R\mathrm{n}, \quad \lambda \in R, \qquad (1)$$

де $M^{n\times n}$ – множина квадратних матриць порядку n.

Метод ітерацій на підпросторі є узагальненням методу обернених ітерацій і полягає в побудові послідовності підпросторів E_t (t = 1, 2, ...), яка зводиться до підпростору E_∞, що містить шукані власні вектори. В методі ітерацій на підпросторі на t-й ітерації обчислюється ортонормований базис підпростору E_t, а також, якщо досягнута збіжність, то визначаються шукані власні пари. Детальний опис методу представлено в [1].

Розроблено гібридний алгоритм методу ітерацій на підпросторі для розв'язування АПВЗ задачі (1), за яким розпаралелювання обчислень на CPU здійснюється в середовищі MPI, а на GPU – за технологією CUDA.

Елементи (головної діагоналі та піддіагональні) стрічкових симетричних матриць A та B розподіляються між процесами CPU за одновимірною блочно-циклічної схемою [2], за якою процесу з логічним номером i розподіляються елементи рядків з номерами js-s+1, ..., js, js-s+1+ps, ..., js+ps, js-s+1+2ps, ..., а процесу з номером i+1 – рядки js+1, ..., js+s, js+1+ps, ..., js+s+ps, js+1+2ps, ..., де p –

кількість процесів, що використовуються, s – кількість рядків у блоці, а j – номер блоку. Цей розподіл для кожного процесу визначається номером першого рядка, елементи якого розподіляються даному процесу.

Зважаючи на те, що операції на GPU виконуються в рамках MPI процесу, розподіл даних аналогічний блочно-циклічній схемі.

Реалізація гібридного алгоритму методу ітерацій на підпросторі базується на факторизації (з використанням GPU) стрічкової матриці A плитковим гібридним алгоритмом LL^T-розвинення [3].

На кожній ітерації виконуються наступні операції:

- розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь (розв'язується кожним процесом, використовуючи попередньо факторизовану матрицю)

$$AX_t = Y_{t-1}; \qquad (2)$$

- обчислення проекції матриці A на підпростір E_t (виконується на GPU)

$$A_t = X_t^T Y_{t-1} \equiv X_t^T A X_t\,; \qquad (3)$$

- обчислення прямокутної матриці (виконується з використанням GPU)

$$W_t = BX_t; \qquad (4)$$

- обчислення проекції матриці B на підпростір E_t (виконується з використанням GPU)

$$B_t = X_t^T W_t \equiv X_t^T B X_t\,; \qquad (5)$$

- розв'язування проблеми власних значень для проекцій (розв'язується кожним процесом незалежно)

$$A_t Z_t = B_t Z_t \Lambda_t; \qquad (6)$$

- обчислення наступного наближення (за рахунок розподіленості даних між процесами, операції виконуються паралельно на CPU)

$$Y_t = W_t Z_t; \qquad (7)$$

- перевірка умов закінчення ітераційного процесу, аналогічно до (6):

$$\frac{\left|\lambda_i^{(t)} - \lambda_i^{(t-1)}\right|}{\lambda_i^{(t)}} \le \varepsilon \quad (i = 1, 2, \ldots, r). \qquad (8)$$

Якщо умова (8) виконуються після t ітерацій, то наближеним розв'язком задачі вважається:

$$\lambda_i^* = \lambda_i^{(t+1)}, \qquad X^* = X_{t+1} Z_{t+1} \quad (i = 1, 2, \ldots, r).$$

Тут, як і при перевірці умов закінчення ітераційного процесу, мається на увазі, що власні значення впорядковано за зростанням

$0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_r \le \ldots$.

Результат роботи гібридного алгоритму – обчислені власні значення λ_i (розташовані у кожному процесі в порядку зростання) та розподілена між процесами матриця X відповідних власних векторів у відповідності до розподілу матриць A та B.

3. Апробація гібридного алгоритму методу ітерацій на підпросторі. Розв’язувалась задача стійкості шаруватого двокомпонентного композитного матеріалу регулярної структури (рис. 1, а) при рівномірному одноосьовому стиску армуючих шарів поверхневого навантаження постійної інтенсивності [4]. Оскільки, задача стійкості розв’язується для розрахункової області кінцевих розмірів (рис 1, б) і досліджується вплив на критичні параметри стійкості граничних умов на бічних сторонах розрахункової області, розрізняється втрата стійкості в композитному матеріалі і композитному зразку, який відповідає цьому матеріалу. У першому випадку граничні умови на бічних сторонах розрахункової області відповідають умовам симетрії. У другому випадку розглядається зразок з вільною від напружень однієї із сторін, а для іншої сторони використовуються ті ж умови, що і в першому випадку. Першу розрахункову схему віднесено до матеріалу, а другу до композитного зразка. Таким чином, представлено дві розрахункові схеми, які дозволяють провести порівняльний аналіз втрати стійкості в структурі матеріалу для різних умов закріплення зразка. При цьому слід мати на увазі, що значення критичних навантажень матимуть більш високі значення, ніж для розрахункових схем, які враховують умови періодичності структури композиту.

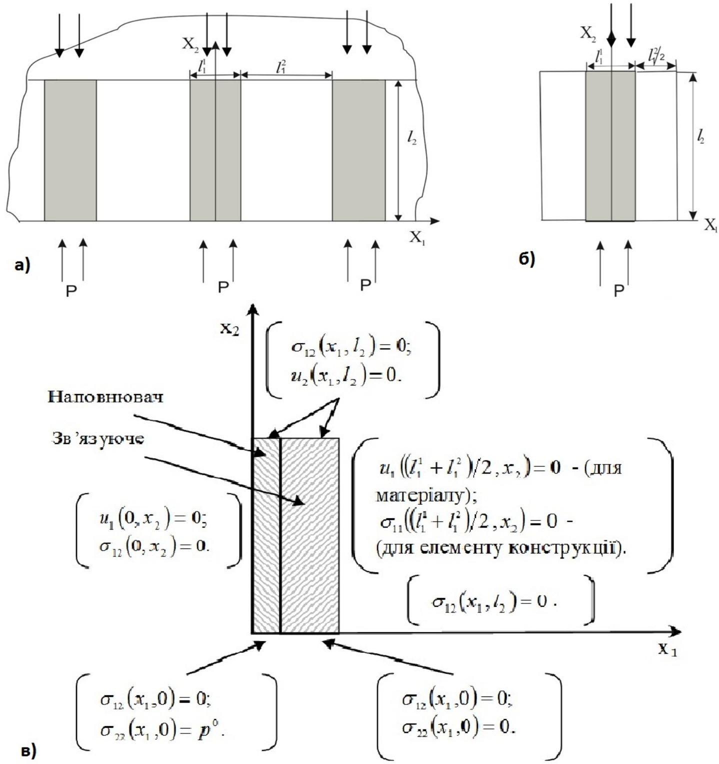

Рис. 1. Схематичне представлення задачі стійкості

При використанні статичного методу Ейлера задача стійкості зводиться до узагальненої задачі на власні значення, в якій мінімальне власне значення λ визначає критичне навантаження, а відповідна власна функція $u = (u_1, u_2)$ – форму втрати стійкості. Рівняння і граничні умови для визначення критичних параметрів стійкості розглянутих композитних структур мають такий вигляд:

$$(\sigma_{im} + \lambda\sigma_{ik}^0 u_{m,k})_{,i} = 0,\ x \in \Omega\,. \qquad (9)$$

$$(\sigma_{21} + \lambda\sigma_{2k}^0 u_{1,k}) = 0 \wedge u_2 = 0,\ x \in S_1\,,$$

$$(\sigma_{12} + \lambda\sigma_{1k}^0 u_{2,k}) = 0 \wedge u_1 = 0,\ x \in S_2$$ – для композитного матеріалу,

$$(\sigma_{im} + \lambda\sigma_{ik}^0 u_{m,k}) = 0,\ x \in S_1$$ – для композитного зразка,

$$(\sigma_{im} + \lambda\sigma_{ik}^0 u_{m,k}) = 0, x \in S_3\,, \qquad (10)$$

‘ $(\sigma_{22} + \lambda\sigma_{22}u_{2,2}) = 0, x \in S_4$,

$(\sigma_{12} + \lambda\sigma_{1k}^0 u_{2,k}) = 0 \wedge u_1 = 0,\ x \in S_5$.

Умова контакту між шарами:

$$\left[\sigma_{ij}\right] = 0, \left[u_i\right] = 0 . \quad (11)$$

Критичне навантаження визначається за умовою:

$P_{kp} = \min|\lambda| / \left(l_1^1 + l_1^2\right) \int\limits_{x_1 \in S_3 \cup S_4} P\left(x_1\right) dx_1 = min|\lambda| P\left(l_1^1 / (l_1^1 + l_1^2\right)$, де λ – мінімальне власне значення задачі (9), (10). Вид співвідношення (11) вказує на той факт, що стискаюче навантаження прикладається тільки до армуючих шарів.

Гібридна програма, що реалізує розроблений гібридний алгоритм, написана на мові програмування C++ з використанням для розпаралелення обчислень на CPU бібліотеку MPICH [5], а для розпаралелення на GPU – бібліотеки cuBLAS [6] та cuSPARSE [7].

Задача розв’язувалася для різних вхідних даних на персональному суперкомп’ютері гібридної архітектури Інпарком_pg (один обчислювальний вузол, два процесори Xeon 5606, 2 GPU Tesla K40) [8] з використанням 8 процесів CPU та двох GPU. Нижче наведено фрагмент протоколу розв’язання задачі з такими вхідними даними: порядок матриць – 12282, напівширина стрічки матриці A – 6212, напівширина стрічки матриці B – 71.

Протокол розв’язування задачі на Інпарком_pg

```
PROBLEM:

Solving of Partial Generalized Eigenvalue Problem
 for Band Symmetric Matrices

INPUT PARAMETERS:
order of matrices     = 12282
bandwise of matrix A = 12423 (2 half bandwidth + 1)
bandwise of matrix B = 141  (2 half bandwidth + 1)
maximal relative errors:
of matrix A elements  = 0.000e+00
of matrix B elements  = 0.000e+00

Process of research and solving of the problem

Method:  Subspace Iterations (MPI + CUDA)
       matrix blocksize           = 16
       number of processors       =  8
       number of GPU              =  2
```

```
    Problem solving: total time = 10.0033e+00

    Results: SOLUTION WAS CALCULATED
             by 20 iterations

    All calculated eigenvalues are minimal

FIRST 3 EIGENVALUES
    Eigenvalues (calculated)   Estimates of Errors
        1.248665556779830e-01        1.893e-06
        1.248734577580778e-01        8.894e-07
        1.248765574182433e-01        2.837e-06

All calculated eigenvalues stored in the file
result.out
```

Час розв'язування задач за розробленим гібридним алгоритмом методу ітерацій на підпросторі значно менший у порівнянні з часом розв'язування цих задач за допомогою послідовних засобів. Зокрема, використовуючи 8 процесів CPU було досягнуто прискорення у 5 – 6 раз у порівнянні з послідовною версією (1 CPU). При розв'язуванні задач гібридним алгоритмом з використанням одного GPU отримано прискорення в 1,25 раз у порівнянні з часом розв'язування паралельним алгоритмом на восьми процесах CPU, а при використанні двох GPU – в 1,4 раз.

Висновки. В роботі розглянуто гібридний алгоритм методу ітерацій на підпросторі для розв'язування часткової АПВЗ для симетричних додатно-означених стрічкових матриць на гібридних комп'ютерах. Створений алгоритм забезпечує високу швидкодію і масштабованість на комп'ютері гібридної архітектури. Програми, що реалізують розроблені гібридний алгоритми, увійшли до складу штатного програмного забезпечення комп'ютерів гібридної архітектури сімейства Інпарком-G та використовувалися для розв'язування практичних науково-технічних задач, зокрема для розрахунку задач стійкості композитних матеріалів при одноосьовому стисненні слоїв наповнювача.

Список використаних джерел:

1. Молчанов И.Н., Попов А.В, Химич А.Н. Алгоритм решения частичной проблемы собственных значений для больших профильных матриц // Кибернетика и системный анализ. – 1992. – № 2. – С. 141 – 147.
2. Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов А.В., Чистякова Т.В., Яковлев М.Ф. Параллельные алгоритмы решения задач

вычислительной математики. – Киев: Наук. думка, 2008. – 248 с.
3. Хіміч О.М., Баранов А.Ю. Гібридний алгоритм розв’язування лінійних систем зі стрічковими матрицями прямими методами. // Компьютерная математика. – 2013. – Вып. 2. – С. 80 – 87.
4. Декрет В.А., Зеленский В.С., Быстров В.М. Численное исследование устойчивости слоистого композитного материала при одоосном сжатии наполнителя. – Киев: Наук. думка, 2008. – 248 с.
5. MPICH. https://www.mpich.org/.
6. cuBLAS. https://developer.nvidia.com/cublas.
7. cuSPARSE. http://docs.nvidia.com/cuda/cusparse.
8. Хіміч О.М., Молчанов И.Н. Попов О.В. та ін. Інтелектуальний персональний суперкомп’ютер для розв’язування науково-технічних задач // Наука и инновации, 2016. – Том 12(4), С. 17 – 31.