УДК. 519.6

О.В. ЧИСТЯКОВ
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ,
alexej.chystyakov@gmail.com

ПРО ОСОБЛИВОСТІ РОЗВ'ЯЗАННЯ АЛГЕБРАЇЧНОЇ ПРОБЛЕМИ ВЛАСНИХ ЗНАЧЕНЬ НА ПАРАЛЕЛЬНИХ КОМП'ЮТЕРАХ З ПРОЦЕСОРАМИ INTEL XEON PHI

Сьогодні коло задач у різних предметних областях, що потребують для розв'язання потужних комп'ютерів, стрімко зростає. Це пов'язано з розвитком чисельного моделювання та чисельного експерименту. Чисельне моделювання дає можливість вивчати явища, які є надто складними для проведення натурних експериментів або це зробити навіть неможливо, як, наприклад, в ядерній енергетиці, моделюванні атмосферних процесів тощо. Для моделювання таких процесів задіюються величезні комп'ютерні ресурси — суперкомп'ютери та кластери, які можуть нараховувати сотні процесорів, багатоядерні комп'ютери з різного роду сопроцесорами, наприклад, графічними процесорами (GPU) тощо. Ці комп'ютери використовуються як локально, так і в Інтернет та грід-мережах, а також у «хмарних обчисленнях».

Ефективність використання паралельних комп'ютерів для розв'язування задач обчислювальної математики, до яких зводиться більшість практичних задач, значною мірою залежить від алгоритмічно-програмного забезпечення.

Виділимо такі загальні критерії ефективності паралельних алгоритмів для розв'язування задач обчислювальної математики [1, 2]:

- формування ефективної топології комп'ютера для розв'язування задачі;
- рівномірне завантаження процесорних пристроїв та ефективний розподіл вихідної інформації;
- масштабування паралельних обчислень;
- синхронізація та мінімізація обмінів між процесами.

В Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова впродовж багатьох років розробляються паралельні комп'ютери різних архітектур — серії СКІТ та ІНПАРКОМ, а також математичне програмне забезпечення, яке використовується для розв'язування прикладних задач [1, 2]. На даний час спільно з ДВП «Електронмаш» розроблено паралельний комп'ютер з процесорами нового покоління Intel Xeon Phi 7210 (64 ядра, 1.3 ГГц), що мають 192 Гб оперативної пам'яті DDR4 та SSD 240 Гб.

Для математичного моделювання більшості процесів та явищ на сучасних комп'ютерах проміжним або кінцевим етапом є розв'язування задач лінійної алгебри, зокрема узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень (АПВЗ) великих розмірів та з різною структурою матриць [2]:

$$Ax = {}^{a}Bx, \tag{1}$$

де A та B — квадратні матриці порядку n, λ і x — власні значення і власні вектори цієї задачі відповідно.

Метод ітерацій на підпросторі застосовується для знаходження r мінімальних власних значень і відповідних їм власних векторів задачі (1). Цей метод є узагальненням методу зворотних ітерацій і полягає в побудові для задачі (1) послідовності підпросторів E_t ($t = 1, 2, ...$), які збігаються до підпростору E_∞, що містить шукані власні вектори [2, 3]. На t-ій ітерації обчислюється ортогональний базис підпростору E_t і при досягненні заданої точності обчислюються шукані власні пари.

Реалізація методу ітерацій на підпросторі зводиться до розв'язування для $t = 1, 2, ...$ таких підзадач:

- знаходження розв'язків системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР):

$$AX_t = Y_{t-1}; \tag{2}$$

- обчислення прямокутної матриці:

$$W_t = BX_t; \tag{3}$$

- обчислення проекцій матриць A та B на підпростір E_t:

$$A_t = X_t^T Y_{t-1} \equiv X_t^T AX_t, \quad B_t = X_t^T W_t \equiv X_t^T BX_t; \tag{4}$$

- розв’язання повної проблеми власних значень для проекцій:

$$A_t Z_t = B_t Z_t \Lambda_t ; \tag{5}$$

- обчислення наступного наближення:

$$Y_t = W_t Z_t . \tag{6}$$

Якщо після k ітерацій виконуються умови закінчення ітераційного процесу, наприклад $\left| \frac{\lambda_i^{(c)} - \lambda_i^{(c-1)}}{\lambda_i^{(t)}} \right| \le \varepsilon$, то проводиться додаткова ітерація і наближеними розв’язками задачі (1) беруться $\lambda_i^* = \lambda_i^{(c+1)}$ (i = 1, 2, ..., r) та перші r стовпчиків матриці $X^* = X_{c+1} Z_{c+1}$ (власні значення, впорядковані за зростанням). Ітераційний процес збігається лінійно, причому швидкість збіжності λ_i визначається відношенням λ_q / λ_1, де q — розмір підпростору E_t, що ітерується. Оскільки на кожній ітерації розв’язується СЛАР (2) з однією і тією ж матрицею (A), то трикутне розвинення (наприклад, LL^T) цієї матриці виконується один раз до початку ітераційного процесу.

Розглянемо особливості паралельних комп’ютерів та технологій програмування, які враховувались при створені паралельних алгоритмів та програм методу ітерацій на підпросторі [2, 3].

MIMD-комп’ютер, як правило, складається з обчислювальних вузлів, що мають по декілька багатоядерних процесорів (CPU) та свою локальну пам’ять, тобто кожен процесор має доступ тільки до локальної пам’яті свого вузла. Ядра CPU призначені для виконання одного потоку послідовних інструкцій з максимальною продуктивністю. CPU сучасних комп’ютерів також мають кеші різних рівнів досить великих розмірів, використовуючи які можна значно підвищити швидкодію алгоритмів. Для розпаралелення обчислень використовується середовище MPI. Комунікаційна взаємодія між вузлами відбувається через Infiniband. Великий вплив на швидкодію алгоритму мають створення ефективної комунікаційної топології та способи рівномірного розподілу інформації між вузлами. Паралельний MPI-алгоритм розглянутого методу використовує блочно-циклічний розподіл масивів даних [2].

Гібридний комп’ютер складається з MIMD-комп’ютера та GPU для швидкого виконання великої кількості паралельних потоків інструкцій за умови однотипних математичних операцій великих об’ємів з використанням технології CUDA. На відміну від CPU на GPU є 6 видів пам’яті зі складною ієрархією та призначенням. Під час створення гібридних алгоритмів виникає необхідність у плануванні обчислень та узгодженні розподілу обчислювальних ресурсів на ядрах CPU і GPU. Крім того, CPU і GPU мають не спільну пам’ять, тому дані, з якими оперують під час розв’язування задачі, необхідно явним чином копіювати з пам’яті CPU в пам’ять GPU і назад. Покращити ефективність алгоритму можна реалізовуючи виконання великих обчислень на GPU паралельно та асинхронно з копіюванням даних. У гібридному алгоритмі даного методу, що описаний вище рівняннями (2)–(6), такими операціями слугують матрично-векторні операції [3].

В паралельному комп’ютері процесор Intel Xeon Phi є хост-процесором, який розроблений для забезпечення високої ефективності розпаралелення обчислень. У ньому інтегрована надшвидка пам’ять MCDRAM та засоби міжядерної комутації з топологією «сітка». Процесор чудово масштабується завдяки вбудованому мережевому контролеру, і, на відміну від GPU, його функціональні можливості не обмежені шиною PCIe. Це забезпечує більшу ефективність на комп’ютері з Intel Xeon Phi, ніж з використанням GPU. Для розпаралелення доцільніше використовувати систему OpenMP. В результаті обчислювальних експериментів на Intel Xeon Phi для даного методу отримано швидкодію на рівні 315 Gflops при використанні восьми ядер, CPU — 60 Gflops, одного GPU Nvidia Tesla K40 — 150 Gflops, а при використанні двох графічних прискорювачів — 250 Gflops.

1. Химич А.Н, Молчанов И.Н., Мова В.И. и др. Численное программное обеспечение MIMD-компьютера Инпарком. — Киев: Наук. думка, 2007. — 222 с.
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. — 247 с.
3. Хіміч О.М., Попов О.В., Чистяков О.В. Гибридные алгоритмы решения алгебраической проблемы собственных значений с разреженными матрицами // Кибернетика и системный анализ. — 2017. — Т. 53, № 6. — С. 132–146.