УДК 519.6
DOI: 10.32626/2308-5878.2019-19.85-91

А. Н. Нестеренко,
О. В. Попов, канд. фіз.-мат. наук,
О. В. Рудич
Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, м. Київ

РОЗВ'ЯЗУВАННЯ СИСТЕМ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ НА КОМП'ЮТЕРАХ З ПАРАЛЕЛЬНОЮ ОРГАНІЗАЦІЄЮ ОБЧИСЛЕНЬ

Запропоновано методологію розв'язування систем нелінійних рівнянь з розрідженими матрицями Якобі на комп'ютерах з паралельною організацією обчислень, яка використовує багаторівневу модель паралельних обчислень, структурну регуляризацію та декомпозицію розріджених даних для приведення матриці системи до блочно-розрідженого вигляду, високопродуктивні блочні та блочно-циклічні алгоритми розв'язування систем лінійних рівнянь.

Ключові слова: *системи нелінійних рівнянь, розріджені матриці Якобі, комп'ютери MIMD-архітектури, комп'ютери гібридної архітектури, структурна регуляризація розріджених даних, декомпозиція розріджених даних.*

Вступ. При чисельному моделюванні природних явищ, поведінки об'єктів під впливом дії навколишнього середовища, проектуванні будівель та механізмів часто виникають, наприклад, при використанні тривимірних моделей, розрахункові (дискретні) задачі з надвеликою кількістю (яка може перевищувати 10^7) рівнянь, у тому числі нелінійних. Причому дані (матриці Якобі) таких нелінійних систем (СНР) мають розріджену структуру, наприклад, блочно-тридіагональну або блочно-п'ятидіагональну. Тобто кількість ненульових елементів значно менша (приблизно дорівнює kn, де n — порядок матриці, а $k << n$) загальної кількості елементів матриці.

Зростання параметрів задач, що розв'язуються, розрахунок на комп'ютерах більш повних моделей об'єктів, процесів, явищ вимагає відповідного зростання продуктивності комп'ютерів. В даний час зростання продуктивності обчислень досягається за рахунок розпаралелювання, яке базується на використанні комп'ютерів з багатьма процесорними пристроями, зокрема з багатоядерними процесорами. В цих комп'ютерах, як правило, реалізується MIMD-архітектура (архітектура з множинним потоком команд і даних). В останні роки також набули поширення гібридні обчислювальні системи, в яких використовуються співпроцесори, наприклад, графічні процесори (GPU), для прискорення

© А. Н. Нестеренко, О. В. Попов, О. В. Рудич, 2019

обчислень при виконанні великих обсягів однорідних арифметичних операцій. На таких співпроцесорах-прискорювачах, як правило, реалізується SIMD-архітектура паралельних обчислень. Такі комп'ютери гібридної архітектури вже зайняли провідні позиції у світовому рейтингу найпродуктивніших комп'ютерів TOP500 [1].

У цій роботі розглядається використання багаторівневої моделі паралельних обчислень для розв'язування систем нелінійних рівнянь на комп'ютерах гібридної архітектури та комп'ютерах з багатоядерними процесорами Intel Xeon Phi серії x200.

Багаторівнева модель паралельних обчислень. Архітектура сучасних високопродуктивних комп'ютерів надає можливість використовувати багаторівневу модель паралельних обчислень — багаторівневий паралелізм:

- верхній рівень (MIMD-модель) — паралелізм процесів (process level parallelism, PLP) — процеси паралельно виконують макрооперації (підзадачі), наприклад, множення матричних блоків, використовуючи як розподілену між ними, так і спільну пам'ять і синхронізуючи обчислення та обміни даними;
- другий рівень (SIMD-модель) — паралелізм потоків (thread level parallelism, TLP) — розпаралелення виконання кожної з макрооперацій, використовуючи декілька потоків і спільну пам'ять;
- третій рівень (векторизація) паралелізм обробки даних векторними процесорними пристроями (data level parallelism, DLP) — паралельно виконуються операції з векторами, наприклад, додавання векторів.

На верхньому рівні використовуються (як правило) засоби MPI, на другому — засоби (директиви) OpenMP (Open Multi-Processing) або програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL. Третій рівень — автоматичне включення паралелізму при компіляції програми.

Постановка задачі. В області $D = \{a_i \le x_i \le b_i,\ i = 1, 2, \ldots, n\}$ знайти n-вимірний вектор $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T \in D$, який задовольняє системі n нелінійних рівнянь

$$F(x) = 0, \qquad (1)$$

де $F(x) = (F_1(x), F_2(x), \ldots, F_n(x))^T$ — n-вимірна вектор-функція, причому $F(x)$ є наближенням до точної вектор-функції $\Phi(x)$ і для цих функцій виконується нерівність $\|F(x) - \Phi(x)\| \le \delta$ для будь-якого $x \in D$. Для розв'язування задачі (1) задаються початкове наближення $x^{(0)} \in D$ і необхідна точність ε отримання наближення до розв'язку системи.

У прикладних галузях, зокрема в розрахунку міцності конструкцій (див., напр., [2]) використовують наступну постановку нелінійної

задачі. Математично статична нелінійна задача розрахунку міцності конструкцій, використовуючи принцип можливих переміщень, може бути поставлена у нескінченновимірному функціональному просторі можливих переміщень U_0 у вигляді варіаційної задачі: знайти вектор-функцію $u \in U_0$, яка для будь-якої вектор-функції $v \in U_0$ задовольняє відповідній інтегральній тотожності

$$a(u,v) = l(f,v); \qquad (2)$$

де нелінійний по u і лінійний по v функціонал $a(u,v)$ пропорційний потенційній енергії деформації, а лінійний по v функціонал $l(f,v)$ пропорційний роботі прикладених зусиль f при навантаженні.

Розв'язки нелінійних задач (2) знаходяться одним з проекційно-варіаційних методів, переважно методом скінченних елементів (МСЕ). Наближені розв'язки МСЕ шукаються у скінченновимірному підпросторі $U_0^h \subset U_0$. Вектор-функції з підпростору U_0^h є кусково-поліноміальними і можуть бути представлені у вигляді лінійної комбінації базисних вектор-функцій $u_h(\chi) = \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j(\chi)$, де φ_j ($j = 1, 2, \ldots, n$) — заданий вище кусково-поліноміальний базис U_0^h. Підставивши в (2) вектор-функції з підпростору U_0^h отримуємо систему нелінійних (відносно x_j) рівнянь

$$a(u_h, \varphi_i) = l(f, \varphi_i), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \qquad (3)$$

Методи розв'язування систем нелінійних рівнянь. У багатьох прикладних застосуваннях реалізуються ітераційні методи розв'язування СНР (1) або (3), які базуються (див., напр., [2, 3]) тією чи іншою мірою на класичному методі Ньютона, що має квадратичну швидкість збіжності. Ітераційний процес збігається, якщо виконується оцінка

$$\| x^{(k)} - x \| \le c \| x^{(k-1)} - x \|^{\alpha},$$

де c — деяка величина, обмежена зверху; α — порядок збіжності методу. Якщо $\alpha = 2$, то досягається квадратична швидкість збіжності ітераційного процесу, якщо $1 < \alpha < 2$, то ітераційний процес збігається надлінійно.

Позначимо $H(x) = \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right\}_{i,j=1}^{n}$ — матриця Якобі системи (1) або (3), $B(x)$ — деяке наближення до $H(x)$. В прикладних застосуваннях для обчислення наближеної матриці Якобі системи (3) часто використовують похідну функціонала $a(u,v)$ у наступному вигляді [2]:

$$a'(u,v,w) = \frac{d}{d\tau} a(u + \tau w, v)\Big|_{\tau=0}, \quad w \in U_0. \quad \text{Тоді} \quad a'(u_h, v_h, w_h) = H(x)y$$

(якщо $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)^T$, $u_h = \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j$, $w_h = \sum_{j=1}^{n} y_j \varphi_j$, а $v_h = \sum_{j=1}^{n} \varphi_j$), а елементи матриці Якобі системи (3) можна обчислити за формулою

$$H(x) \equiv \{h_{ij}\}_{i.j=1}^{n} = \{a'(u_h, \varphi_i, \varphi_j)\}_{i.j=1}^{n}.$$

Ітераційний процес методу Ньютона при заданому початковому наближенні записується так ($k = 1, 2, \ldots$ — номер ітерації, $F^{(k)} \equiv F(x^{(k)})$ і $B^{(k)} \equiv H^{(k)} \equiv H(x^{(k)})$)

$$B^{(k-1)} w^{(k)} = -F^{(k-1)}, \tag{4}$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + w^{(k)}. \tag{5}$$

У багатьох випадках для розв'язування СНР використовують модифікації методу Ньютона, які називають квазіньютонівськими (ці методи мають надлінійну швидкість збіжності, див. [3]), в тому числі:

- методи Бройдена і Пауелла (для симетричних матриць Якобі), у яких у ході ітераційного процесу (4), (5) обчислені на основі початкового наближення $B^{(0)} \equiv H^{(0)}$ матриці уточнюється з використанням матрично-векторних операцій за формулами

$$B^{(k)} = B^{(k-1)} + \frac{y^{(k)}(w^{(k)})^T + w^{(k)}(y^{(k)})^T}{(w^{(k)})^T w^{(k)}} - \frac{((y^{(k)})^T w^{(k)}) w^{(k)} (w^{(k)})^T}{((w^{(k)})^T w^{(k)})^2}$$

(в методі Пауелла) та $B^{(k)} = B^{(k-1)} + \frac{y^{(k)}(w^{(k)})^T}{(w^{(k)})^T w^{(k)}}$ (в методі Бройдена);

тут $y^{(k)} = F^{(k)} - F^{(k-1)} - B^{(k-1)} w^{(k)}$;

- метод Бурдакова, який при спеціальному виборі ітераційного параметра забезпечує глобальну збіжність до одного з розв'язків системи на основі заданого початкового наближення; ітераційний процес реалізується за формулами (4) та $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k w^{(k)}$, де $B^{(k)}$ — скінченно-різницева апроксимація матриці Якобі $H^{(k)}$, а ітераційний параметр α_k обчислюється спеціальним чином (див. [3]).

Отже, розв'язування СНР з розрідженою структурою даних, як правило, базується на лінеаризації нелінійних рівнянь — пошук розв'язків реалізується через розв'язування послідовності систем лінійних рівнянь. Ці СЛАР (4) мають декілька особливостей, які впливають на вибір методів та засобів для їх розв'язування на комп'ютерах з паралельною організацією обчислень, а саме:

- високий порядок — від 100 000 до десятків мільйонів;
- розріджена структура матриць СЛАР — стрічкова, профільна, блочно-розріджена тощо;
- симетричність або несиметричність матриць СЛАР;

- додатно визначеність або напіввизначеність матриць СЛАР.

Паралельні алгоритми розв'язування СНР з розрідженою структурою даних. Ітераційні процеси викладених вище методів розв'язування СНР (1) або з розрідженою структурою даних в загальному випадку можна записати у вигляді (k = 1, 2, ...) (4) та (5) або $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k w^{(k)}$ в методі Бурдакова.

Структурна регуляризація розріджених матриць. Отже основною операцією на кожній ітерації є розв'язування СЛАР (4) з розрідженою матрицею $B^{(k-1)}$. Структура розріджених матриць визначається нумерацією невідомих і може бути регулярною (наприклад, стрічковою) або нерегулярною.

З метою зменшення кількості арифметичних операцій для розв'язування СЛАР (4) з розрідженою матрицею шляхом структурної регуляризації — перестановки рядків і стовпчиків (тобто перенумерації невідомих) таку матрицю приводять до одного із стандартних виглядів: стрічкового, профільного, блочно-діагонального з обрамленням, «хмарочосного» тощо. Існує декілька алгоритмів [4] оптимізації структури розрідженої матриці (фактор-дерев, Катхілл–Маккі, паралельних перерізів, мінімальної степені тощо).

Багаторівневий паралелізм передбачає використання блочних та блочно-циклічних алгоритмів на основі блочного представлення матриць. Тому доцільно структурно регуляризувати розріджену матрицю — оптимізувати блочно-розріджену структуру матриці, визначивши в блочному розбитті нульові блоки та якомога більше заповнені ненульові блоки і використавши один з названих вище алгоритмів (причому замість елементів матриці в алгоритмах використовуються блоки) [5].

Декомпозиція та розподіл між процесорними пристроями розріджених даних. Розподіл між процесорними пристроями даних СНР визначається розподілом даних для розв'язування СЛАР (4). Достатньо добру збалансованість завантаження процесів забезпечують паралельні версії алгоритмів прямих методів розв'язування СЛАР, в яких використовуються так звані циклічні схеми розподілу і обробки матриць (див. напр. [3]). У випадках стрічкових, профільних та хмарочосних матриць паралельні алгоритми, в яких використовується одновимірні блочно-циклічні схеми розподілу елементів матриць, дозволяють досягти приблизно рівного обсягу обчислень і обмінів, що виконуються кожним паралельним процесом в кожний момент часу. У випадку блочно-діагональної матриці з обрамленням використовуються блочні алгоритми та відповідний блочний розподіл елементів матриці [5].

Методологія розв'язування СНР. Отже, пропонується наступна послідовність дій для розв'язування СНР з розрідженими даними на сучасних високопродуктивних комп'ютерах, в тому числі гібридної архітектури:

- використовуючи один з алгоритмів структурної регуляризації, формування блочно-розрідженої структури матриць СЛАР (4) на основі вихідної структури її ненульових елементів;
- декомпозиція розріджених матриць та розподіл отриманих рядків або стовпчиків ненульових блоків між процесорними пристроями;
- ітераційний процес розв'язування СНР — на k-й ітерації ($k = 1, 2, \dots$) алгоритму методу Ньютона або квазіньютонівського виконуються наступні макрооперації:
  1) обчислення розподілених між MPI-процесами компонент вектор-функції $F^{(k-1)}$ та елементів ненульових блоків матриці $B^{(k-1)}$;
  2) розв'язування отриманої СЛАР (4), використовуючи відповідний (до структури матриці $B^{(k-1)}$) паралельний алгоритм [3, 5–7], та обчислення розподілених між MPI-процесами компонент наступного наближення до розв'язку СНР $x^{(k)}$;
  3) перевірка умов закінчення ітераційного процесу за формулами [7]: з початку $\| F^{(k)} \| \le \varepsilon$, а далі — $\| (H^{(k)})^{-1} \| \| F^{(k)} \| \le \varepsilon$.

Ці макрооперації виконуються на верхньому рівні паралелізму з використанням нижніх рівнів для виконання великих обсягів однорідних обчислень, у тому числі матрично-векторних та матрично-матричних операцій.

Висновки. Використовуючи багаторівневу модель паралельних обчислень з урахуванням особливостей архітектури комп'ютера розроблено ефективні алгоритми та програми розв'язування СНР на паралельних комп'ютерах гібридної архітектури та з процесорами Intel Xeon Phi серії x200. Це алгоритмічно-програмне забезпечення використано для розв'язування низки задач прогнозування ресурсу відповідальних зварних конструкцій [5]. При цьому час розв'язування задач суттєво скорочується, що дає можливість розв'язувати задачі високих порядків у реальному часі, які висуває сучасне життя перед наукою.

Список використаних джерел:

1. URL: http://www.top500.org
2. Городецкий А. С., Евзеров И. Д. Компьютерные модели конструкций. Киев : ФАКТ. 2007. 394 с.
3. Химич А. Н., Молчанов И. Н., Попов А. В. и др. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. Киев : Наук. думка, 2008. 248 с.
4. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. М. : Мир, 1984. 334 с.
5. Velikoivanenko E. A., Milenin A. S., Popov A. V. at other. Methods of Numerical Forecasting of Serviceability of Welded Structures on Computers of Hybrid Architecture. *Cybernetics and Systems Analysis.* 2019. Vol. 53, N 1, January. P. 117–127.
6. Химич А. Н., Попов А. В., Чистяков А. В. Гибридные алгоритмы решения алгебраической проблемы собственных значений с разреженными матрицами. *Кибернетика и системный анализ.* 2017. Т. 53, № 6. С. 132–146.

7. 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.

SOLVING OF THE SYSTEMS OF NON-LINEAR EQUATIONS ON COMPUTERS WITH PARALLEL ORGANIZATION OF CALCULATIONS

The methodology for the solving of non-linear systems with sparse Jacobi matrices on parallel computers is proposed, which uses a multilevel parallel computing model, structural regularization and decomposition of sparse data for reducing system's matrix to the block-sparse form, high-performance block and block-cyclic algorithms for solving systems of linear equations.

Key words: *systems of non-linear equations, sparse Jacobi matrices, MIMD-architecture computers, hybrid-architecture computers, structural regularization of the sparse data, decomposition of the sparse data.*

Одержано 15.02.2019

УДК 519.9
DOI: 10.32626/2308-5878.2019-19.91-97

О. П. Нечуйвітер, д-р фіз.-мат. наук,
Г. В. Каргапольцева, здобувач,
К. В. Дараган, аспірантка

Українська інженерно-педагогічна академія, м. Харків

ОПТИМАЛЬНА ЗА ПОРЯДКОМ ТОЧНОСТІ КУБАТУРНА ФОРМУЛА НАБЛИЖЕНОГО ОБЧИСЛЕННЯ ПОДВІЙНОГО ІНТЕГРАЛУ ВІД ШВИДКООСЦИЛЮЮЧИХ ФУНКЦІЙ ЗАГАЛЬНОГО ВИДУ

Розглядається оптимальна за порядком точності кубатурна формула наближеного обчислення подвійного інтегралу від швидкоосцилюючих функцій загального виду на класі диференційовних функцій у випадку, коли інформація про функції задана їх слідами на відповідних лініях.

Ключові слова: *кубатурна формули, інтеграли від швидкоосцилюючих функцій, клас диференційовних функцій.*

Вступ. Задача наближеного обчислення інтегралів від швидкоосцилюючих функцій двох змінних загального виду

$$I(f, g, \omega) = \int_0^1 \int_0^1 f(x, y)\, \mathrm{e}^{i\omega g(x,y)}\, dxdy, \qquad (1)$$

© О. П. Нечуйвітер, Г. В. Каргапольцева, К. В. Дараган, 2019