КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

О.В. ЧИСТЯКОВ, О.О. НІКОЛАЙЧУК, П.С. ЄРШОВ

ПРО МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАДАЧ СТІЙКОСТІ КОНСТРУКЦІЙ НА СУЧАСНИХ КОМП'ЮТЕРАХ

Розглядаються особливості комп'ютерного моделювання задач стійкості конструкцій, які зводяться до розв'язування задач на власні значення, на паралельних комп'ютерах з новітніми процесорами Intel Xeon Phi.

Вступ. Суттєве поліпшення якості математичного моделювання та проектування в галузях машинобудування, будівництва тощо можливе тільки при використанні принципово нових тривимірних моделей, переходу від комп'ютерного моделювання окремих вузлів та агрегатів до розрахунку та оптимізації виробу в цілому. Причому велика кількість таких задач зводиться до розв'язування алгебраїчної проблеми власних значень (АПВЗ) розріджених матриць, розміри яких можуть досягати десятки мільйонів. Розгляд проблем в такій постановці приводить до математичних моделей надвеликих розмірів, для комп'ютерної реалізації яких не вистачає обчислювальних ресурсів сучасних персональних комп'ютерів та робочих станцій. Одним з перспективних напрямків розвитку високопродуктивних обчислень автори вбачають у використанні потужних комп'ютерів, які здатні реалізувати обчислення до 3 Тфлопс у форматі персонального комп'ютера з новітніми процесорами Intel Xeon Phi. Для цього створено ефективні паралельні алгоритми для розв'язування узагальненої част-кової АПВЗ, які враховують характерні властивості задачі, розріджену структуру матриць та архітектурні особливості комп'ютера.

Паралельний персональний комп'ютер з процесорами Intel Xeon Phi нового покоління. В 2017 році Інститутом кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України спільно з Державним підприємством «Електронмаш» розроблено новий вітчизняний інтелектуальний персональний комп'ютер Інпарком_хр з центральним процесором нового покоління Intel Xeon Phi, призначений для математичного моделювання процесів з великими обсягами даних у галузях електрозварювання, машинобудування, будівництва тощо [1]. Ця розробка розвиває концептуальні принципи інтелектуалізації паралельних комп'ютерів різної архітектури сімейства Інпарком [2 – 3], які розробляються на протязі останніх десяти років Інститутом кібернетики та ДП «Електронмаш».

Процесор нового покоління Intel Xeon Phi – це перший завантажувальний хост-процесор компанії Intel, який спеціально розроблений для розпаралелювання задач надвеликого розміру, і в якому вперше інтегровані пам'ять і технології комутації [4]. Тому, на відміну від існуючих процесорів, які використовують співпроцесори або GPU-прискорювачі, його функціональні можливості не обмежені комунікаційними затримками.

Завдяки відсутності таких обмежень новітні процесори Intel Xeon Phi забезпечують велику ефективність і масштабованість, здатні працювати в різноманітних конфігураціях. Цей процесор є третім поколінням процесорів на базі архітектури Intel MIC та другим у поколінні Xeon Phi (Intel Xeon Phi x 200 Family) під кодовою назвою Knights Landing [5], в якому передбачено ефективне використання оперативної пам'яті різних рівнів, а також використання векторних регістрів (рис. 1) [6].

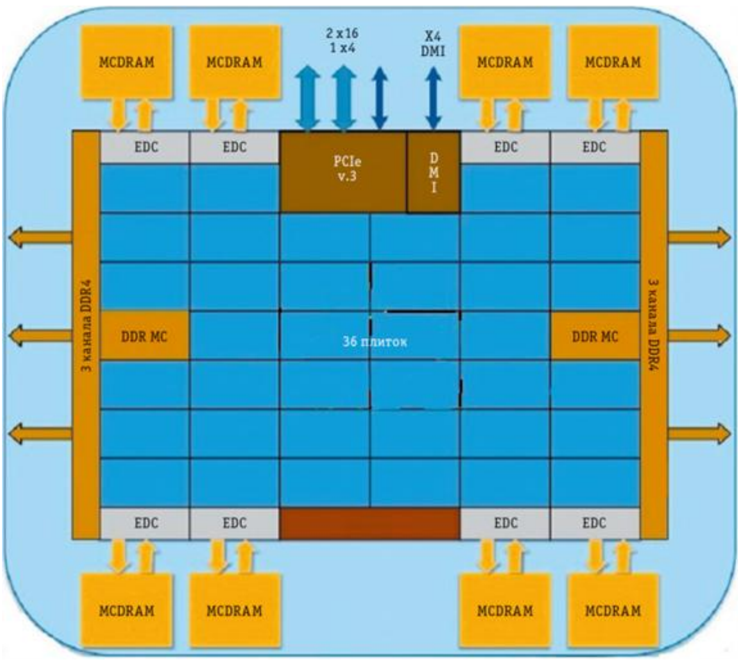


РИС. 1. Архітектура процесора Knights Landing

Процесор Knights Landing має у своєму складі до 36 так званих плиток (tiles) із топологією зв'язків між ними – «двовимірна решітка». Кожна «плитка» – два ядра Intel Atom Airmont (14 НМ версія Silvermont) з двома VPU (векторними процесорними пристроями) – AVX512 для роботи з числами у форматі з плаваючою комою подвійної точності.

Кожне ядро має кеші команд і даних по 32 Кбайт з додатковим кешем другого рівня місткістю 1 Мбайт, що розділяється між ядрами плитки. У мікросхемі забезпечується когерентність кеша другого рівня для всіх ядер з загальною місткістю до 36 Мбайт. Одне таке ядро припускає одночасне використання чотирьох ниток, або тредів (потоки команд, що виконуються одночасно). До складу процесора входять також вісім модулів «ближньої» пам'яті MCDRAM (Multi-Channel DRAM) загальною місткістю 16 Гбайт та пропускною здатністю більше 400 Гбайт/с, що мають доступ до плитки.

Крім того, є ще можливість для звернення до «далекої» пам'яті DDR4 2400 місткістю до 384 Гбайт і пропускною здатністю більше 90 Гбайт/с. «Ближня» пам'ять може працювати в трьох різних режимах: як кеш «далекої» пам'яті (Cache Mode); у складі єдиного адресного простору з «далекою» пам'яттю (Flat Mode); у комбінованому режимі (Hybrid Mode), коли частина MCDRAM використовується як кеш, а частина – в єдиному адресному просторі з оперативною пам'ятю DDR4.

Для паралельних комп'ютерів з новітніми процесорами Intel Xeon Phi створено бібліотеку інтелектуальних паралельних програм Inparlib_xp з обчислювальної математики, до складу якої входять паралельні програми для розв'язування задач на власні значення розріджених матриць. Кожна програма в ході обчислювального процесу перевіряє відповідність вибраного алгоритму математичним властивостям комп'ютерної моделі задачі; формує ефективну конфігурацію комп'ютера з процесорів, що використовуються; виконує початкову розсилку даних; розв'язує задачу і оцінює достовірність отриманого розв'язку або повідомляє причину відмови в розв'язуванні задачі вибраним алгоритмом [2, 7].

Бібліотека програм Inparlib_xp – штатне програмне забезпечення персонального паралельного комп'ютера Інпарком_xp, що використовується при математичному моделюванні об'єктів і процесів у різних предметних областях.

Технічні характеристики та стандартні програмні засоби персонального комп'ютера Інпарком_xp [7]:

- процесор Intel Xeon Phi 7210 – 32 «плитки», з'єднані двомірною решіткою, 64 ядра, 16 Гб «швидкої» пам'яті (MCDRAM);
- кожна плитка містить 2 ядра, 2×2 VPU (векторні процесори), кеш команд і даних першого рівня – 32 Кб, кеш другого рівня – 1 Мб;
- основна операційна система – Linux та Windows;
- оперативна пам'ять – 192 Гбайт, накопичувач SSD – 240 Гбайт, пікова (теоретична) продуктивність (DP) – 2.663 Tflops, максимальна продуктивність (DP, тест Linpack) – 1.793 Tflops;

- компілятори Intel – C, C++, Fortran;
- системи розпаралелення MPI, OpenMP;
- бібліотека Intel Math Kernel (MKL);
- бібліотека інтелектуальних паралельних програм Inparlib_xp.

2. Математичне моделювання задачі стійкості композитного матеріалу. У співпраці з Інститутом механіки імені С.П. Тимошенка НАН України проведено математичне моделювання задачі тривимірної теорії стійкості шарувато композитного матеріалу при стиску поверхневим навантаженням, яка зводиться до розв'язування часткової узагальненої АПВЗ стрічкових матриць [8]. Саме на розв'язування АПВЗ затрачається найбільше комп'ютерних ресурсів та часу. Отже, ефективність розв'язування всієї задачі в значній мірі залежить від ефективного розв'язування АПВЗ.

Тому застосовано розроблені інтелектуальні паралельні програми з бібліотеки програм Inparlib_xp, що реалізують паралельний алгоритм методу ітерацій на підпросторі для стрічкових матриць [9].

Основні етапи паралельного алгоритму методу ітерацій на підпросторі на паралельній архітектурі з декількома процесорами Intel Xeon Phi виконуються при використанні системи MPI, а саме.

1. Формування розподіленої між MPI-процесами матриці початкових векторів Y_0, що ітеруються. Ця операція виконується кожним процесом окремо.

2. Факторизація стрічкової симетричної додатно визначеної матриці A паралельним блочним алгоритмом LL^T-розвинення.

3. Виконання ітераційного процесу (t = 1, 2,…), за яким на кожній ітерації реалізуються такі підзадачі (логічно завершені частини алгоритму):

- розв'язування паралельним алгоритмом системи лінійних алгебраїчних рівнянь з трикутними матрицями

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

- обчислення MPI-процесами проекції матриці A на підпростір E_t

$$A_t = X_t^T Y_{t-1} \equiv X_t^T A X_t; \tag{2}$$

- обчислення прямокутної матриці (виконується кожним MPI-процесом)

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

- обчислення проекції матриці B на підпростір E_t (виконується кожним MPI-процесом)

$$B_t = X_t^T W_t \equiv X_t^T B X_t; \tag{4}$$

- розв'язування повної проблеми власних значень для проекцій (виконується кожним MPI-процесом)

$$A_t Z_t = B_t Z_t \Lambda_t, \quad \text{де } \Lambda_t = diag(\lambda_i); \tag{5}$$

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

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

- перевірка умов закінчення ітераційного процесу (ε – задана точність)

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

якщо ця умова виконується після t ітерацій, то наближеним розв’язком задачі вважається:

$$\lambda_i^* = \lambda_i^{(t+1)}, \qquad X^* = X_{t+1} Z_{t+1}\,.$$

Багатопоточне виконання обчислень на спільній пам’яті ядер у кожному процесі виконується при використанні системи OpenMP.

Результат роботи гібридного алгоритму – обчислені власні значення λ_i та матриця X відповідних власних векторів за формулами (1 – 6). Обчислені мінімальні власні значення стрічкових матриць дають можливість визначити величини критичних параметрів стійкості шарувато композитного матеріалу при стисненні поверхневим навантаженням.

Задача розв’язувалася з такими вихідними даними: порядок матриць – 12282; напівширина стрічки матриці A – 6212 та матриці B – 71; обсяг пам’яті – 2 Gb.

Розв’язування задачі проведено на паралельних комп’ютерах різної архітектури:

− інтелектуальна робоча станція кластерної архітектури Інпарком_256 [2, 3] – 32 вузли, по два Xeon 5606 (4 ядра), 8 Gb RAM на кожен вузол;

− персональний паралельний комп’ютер гібридної архітектури – багатоядерний комп’ютер з двома графічними процесорами Інпарком_pg [4] – 1 вузол, два Xeon 5606 (4 ядра), 24 Gb RAM, 2 GPU Tesla K40;

− персональний паралельний комп’ютер Інпарком_xp з новітнім хост-процесором Intel Xeon Phi [1] – 1 вузол, Xeon Phi 7210 (64 ядра, 16 Gb MCDRAM), 192 Gb RAM.

Часові результати розв’язування різними алгоритмами:

− послідовним алгоритмом час розв’язування – 22 хв. 38 сек;

− паралельним алгоритмом [2] на Інпарком_256, використовуючи 4 вузли (8 процесорів по 4 ядра), час розв’язування – 3 хв. 13 сек;

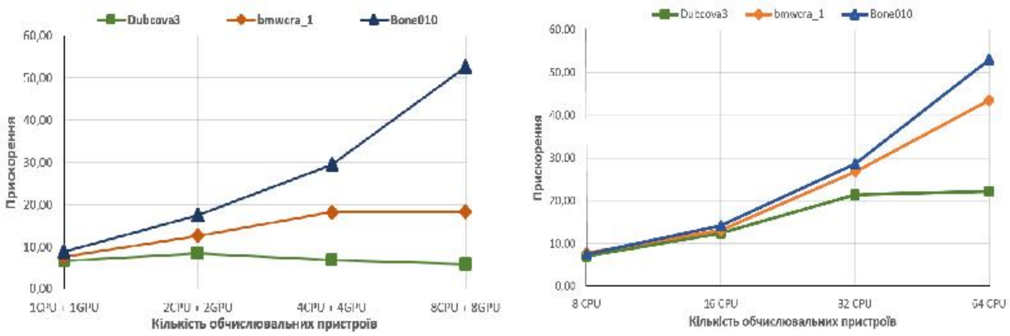
− паралельним алгоритмом [3] на персональному гібридному комп’ютері Інпарком_pg: при використанні одного CPU та відповідного йому GPU – 1 хв. 15 сек, при використанні двох CPU та відповідних двох GPU – 0 хв. 40 сек;

− паралельним алгоритмом [7] на Інпарком_xp з новітнім процесором Intel Xeon Phi, використовуючи 64 ядра, – 0 хв. 26 сек.

Отже, маємо такі прискорення паралельних алгоритмів у порівнянні з послідовною версією: на MIMD-комп’ютері – в 7 раз; на гібридному комп’ютері – в 18 і 33 разів, використовуючи один і два GPU відповідно; за новим паралельним алгоритмом на комп’ютері з новітніми Intel Xeon Phi процесорами (64 ядра) отримано прискорення в 50 раз.

Для експериментального дослідження ефективності розробленого паралельного алгоритму методу ітерацій на підпросторі розв’язування узагальненої часткової АПВЗ використано такі розріджені матриці з колекції Флоридського університету [10]: Dubcova3 – порядок матриці 146 689, кількість ненульових елементів 3 636 643; bmwcra_1 – порядок матриці 148 770, кількість ненульових елементів 10 641 602; Bone010 – порядок матриці 986 703, кількість ненульових елементів 47 851 783.

На рис. 2 показано порівняння прискорення нового паралельного алгоритму на комп’ютері Інпарком_xp та прискорення гібридного алгоритму на інтелектуальній робочій станції Інпарком_g з графічними процесорами, що має такі технічні характеристиками: 4 вузли, у кожному вузлі – два процесори Xeon 5606 по 4 ядра, 24 Gb RAM та 2 GPU Nvidia Tesla M2090.



а б

РИС. 2. Прискорення алгоритмів: а – гібридного, б – паралельного

На рисунку бачимо варіант а – на Інпарком_g для матриць невеликого розміру (Dubcova3) при виході за межі обчислювального вузла (коли кількість використаних GPU більша двох) наступає насичення процесу обчислювальними ресурсами. А для матриць bmwcra_1 та Bone010 із збільшенням кількості CPU та GPU прискорення зростає. На комп’ютері Інпарком_xp з новітнім процесором Intel Xeon Phi варіант б – прискорення нового паралельного алгоритму значно зростає у порівнянні з гібридним алгоритмом для всіх трьох матриць.

Отримані результати вказують на те, що розроблений паралельний алгоритм може бути використаний також для розріджених матриць загального вигляду або для щільних матриць невеликого порядку.

На рис. 3 показано графіки, які демонструють залежність прискорення розробленого паралельного алгоритму розв’язування часткової АПВЗ стрічкових матриць від напівширини стрічки. Експериментальне дослідження проведено для матриць порядку 250 000 з різною напівшириною стрічки, які отримано шляхом дискретизації методом скінченних елементів змішаної крайової задачі для оператора Лапласа в прямокутному паралелепіпеді.

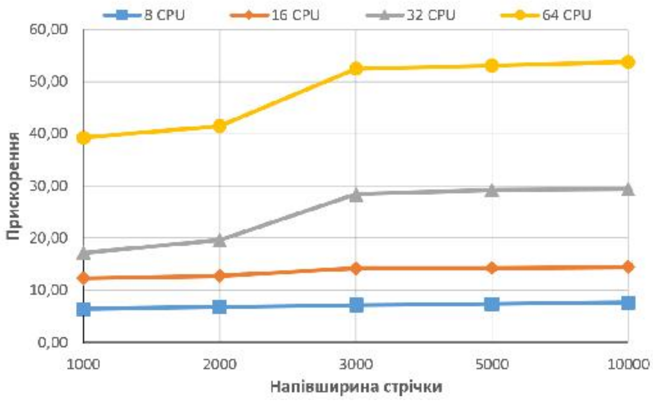


РИС. 3. Залежність прискорення алгоритму від напівширини стрічки матриці

З графіків на цьому рисунку видно, що створений паралельний алгоритм добре масштабований, прискорення значно зростає при збільшенні кількості паралельних процесів (CPU) для всіх задач.

Найбільше прискорення отримується для задач з напівшириною стрічки 3000 і більше. Це пояснюється зростанням завантаженості обчислювальних ядер при виконанні матрично-векторних операцій.

Отже, найефективніше можна використати продуктивність новітніх процесорів Intel Xeon Phi, якщо математичні операції виконуватимуться над великим обсягом даних та кожен CPU буде максимально заповнений.

Висновки. Для ефективного виконання математичного моделювання процесів та явищ у різних предметних областях необхідно використовувати сучасні потужні паралельні комп'ютери, а також алгоритми, які враховують як властивості задачі, так і архітектурні особливості паралельних комп'ютерів. Створено паралельний алгоритм для розв'язування часткової узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень стрічкових матриць на паралельних комп'ютерах з новітніми процесорами Intel Xeon Phi, який забезпечує високу ефективність. Це підтверджується чисельними експериментами з тестовими матрицями та при моделюванні задачі стійкості конструкцій на паралельному персональному комп'ютері Інпарком_xp з процесором Intel Xeon Phi нової архітектури. Розроблений алгоритм входить до складу бібліотеки інтелектуальних паралельних програм з обчислювальної Inparlib_xp – штатного програмного забезпечення комп'ютера Інпарком_xp.

А.В. Чистяков, А.А. Николайчук, П.С. Ершов

О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ЗАДАЧ УСТОЙЧИВОСТИ КОНСТРУКЦИЙ НА СОВРЕМЕННЫХ КОМПЬЮТЕРАХ

Рассматриваются особенности компьютерного моделирования задач устойчивости конструкций, которые сводятся к решению задач на собственные значения, на параллельных компьютерах с новейшими процессорами Intel Xeon Phi.

A.V. Chystyakov, A.A. Nikolaychuk, P.S. Ershov

ON MATHEMATICAL MODELING OF TASKS ON MODERN COMPUTERS

The features of computer simulation on parallel computers with the latest Intel Xeon Phi processors of the problems of structure stability, which are reduced to solving eigenvalue problems, are considered.

Список літератури

1. Хіміч О.М., Мова В.І., Ніколайчук О.О., Попов О.В., Чистякова Т.В., Тульчинський В.Г. Інтелектуальний паралельний комп'ютер на процесорах Intel Xeon Phi нового покоління. *Наука та інновації, науково практичний журнал НАН України*. 2018. 14 (6). С. 60 − 73.
2. Химич А.Н., Молчанов И.Н., Мова В.И. и др. Численное программное обеспечение MIMD-компьютера Инпарком. Киев: Наукова думка, 2007. 222 с.
3. Хіміч О.М., Молчанов І.М., В.І. Мова та ін. Інтелектуальний персональний суперкомп'ютер для розв'язування науково-технічних задач. *Наука та інновації, науково практичний журнал НАН України.* 2016. 12 (5). С. 17 – 31.
4. IntelXeon Phi. URL: https://www.intel.com/content/wwilus/en/products/processors/xeon-phi/ (дата звернення: 20.04 2018).
5. HC27.25.710–Knights–Landing–Sodani–Intel_copy.pdf. URL: https://www.hotchips.org/ (дата звернення: 05.12. 2018).
6. TOP 500 Supercomputer Sites. [Електронний ресурс], Lists: 2018 (11), режим доступу: https://www.top500/org/
7. Чистяков О.В. Про особливості розв'язання алгебраїчної проблеми власних значень на паралельних комп'ютерах з процесорами Intel Xeon Phi. Матеріали Міжнародної наукової конференції «*Сучасна інформатика: проблеми, досягнення та перспективи розвитку*». Київ, 13 –15 грудня 2017 р. С. 166 – 167.
8. Гузь А.Н., Декрет В.А. Модель коротких волокон в теории устойчивости композитов. LAP, 2015, 315 с.
9. Khimich A.N., Popov A.V., Chistyakov O.V. Hybrid algorithms for solving the algebraic eigenvalue problem with sparse matrix. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2017. Vol. 53, N 6. P. 132 – 146.
10. The SuiteSparse Matrix Collection [Електронний ресурс], 2015, режим доступу: https://cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/

Одержано 11.12.2018

Про авторів:

Чистяков Олексій Валерійович,
молодший науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України,

Ніколайчук Олександр Олександрович,
завідувач лабораторії ДП «Електронмаш»,

Єршов Павло Сергійович,
аспірант Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України.