УДК 519.63

В.М. Волков[1], Ю.В. Буяльская[2], И.Д. Врублевский[3], О.П. Коленченко[4]
[1]д-р физ.-мат. наук, проф. каф. веб-технологий и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета
[2]аспирант каф. веб-технологий и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета
[3]аспирант каф. веб-технологий и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета
[4]магистрант каф. веб-технологий и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета
e-mail: v.volkov@tut.by

ПРЯМЫЕ И ИТЕРАЦИОННЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕАЛИЗАЦИИ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ЧЕБЫШЕВА ДЛЯ МНОГОМЕРНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ GPGPU В СРЕДЕ MATLAB

Представлен сравнительный численный анализ эффективности стандартных прямых и итерационных алгоритмов реализации спектральных методов Чебышева для многомерных дифференциальных краевых задач с использованием технологии GPGPU в системе Матлаб. Показано, что итерационные методы семейства сопряженных градиентов с переобусловливателем Якоби превосходят в эффективности прямые методы даже при сравнительно небольших размерностях сетки. Кроме того, при использовании GPU бюджетного сегмента доступно многократное (2–4 раза) ускорение итерационных методов, при этом преимущество в эффективности реализации арифметических операций с разреженными матрицами возрастает с ростом их размерности.

Введение

Комплексы программных и аппаратных средств поддержки параллельных вычислений в настоящее время имеют тенденцию стать неотъемлемой составляющей современной среды разработки и функционирования прикладных программ для ресурсоемких научных и инженерных расчетов. Существенный прогресс в области практического использования преимуществ параллельного программирования в последнее десятилетие связан с внедрением данной технологии в программные пакеты и такие системы научно-технических расчетов, как Matlab, Maple, Matematica и др. Например, в продуктах компании Mathworks [1–2] реализован широкий спектр возможностей параллельного программирования с использованием многоядерных процессоров, кластеров и графических процессоров (GPU), при этом поддержка параллельных алгоритмов во многих случаях реализована на уровне базовых функций (например, функций решения задач линейной алгебры, оптимизации и др.), составляющих ядро системы Matlab.

В данной работе мы остановимся на сравнительном анализе некоторых новых возможностей реализации спектральных методов решения дифференциальных краевых задач на примере задачи Дирихле для двумерного уравнения Пуассона и краевой задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений в среде Matlab с использованием технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture) – программно-аппаратной архитектуры параллельных вычислений с использованием GPU.

Постановка задачи и численный метод

Рассмотрим задачу Дирихле для уравнения Пуассона в двумерной прямоугольной области:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=f(x,y), \quad x,y\in[-1,1],$$
$$u(-1,y)=u(1,y)=u(x,-1)=u(x,1)=0. \tag{1}$$

Спектральный метод Чебышева (см., например, [3]) для вычисления приближенного решения задачи (1) во внутренних узлах сетки (x_i, y_j):

$$x_i=\cos\frac{i\pi}{N}, \quad y_j=\cos\frac{j\pi}{N}, \quad j=1,\dots,N-1,$$

приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$AU=F. \tag{2}$$

Здесь компоненты вектора $U=(U_1,U_2,\dots,U_M)^T$ – приближенное решение в узлах сетки: $u(x_i,y_j)\simeq U_m$, $m=N(j-1)+i$, $M=(N-1)^2$, $A\in R^{M\times M}$,

$$A=I\otimes D+D\otimes I, \tag{3}$$

где $I\in R^{(N-1)\times(\mathrm{N}-1)}$ – единичная матрица, $D\in R^{(N-1)\times(\mathrm{N}-1)}$ – матрица спектрального дифференцирования Чебышева [4], в которой удалены первые и последние строки и столбцы в соответствии с нулевыми краевыми условиями задачи (1). Матрица системы уравнений (2) имеет разреженную блочную структуру, пример которой для случая $N=9$ представлен на рисунке 1.

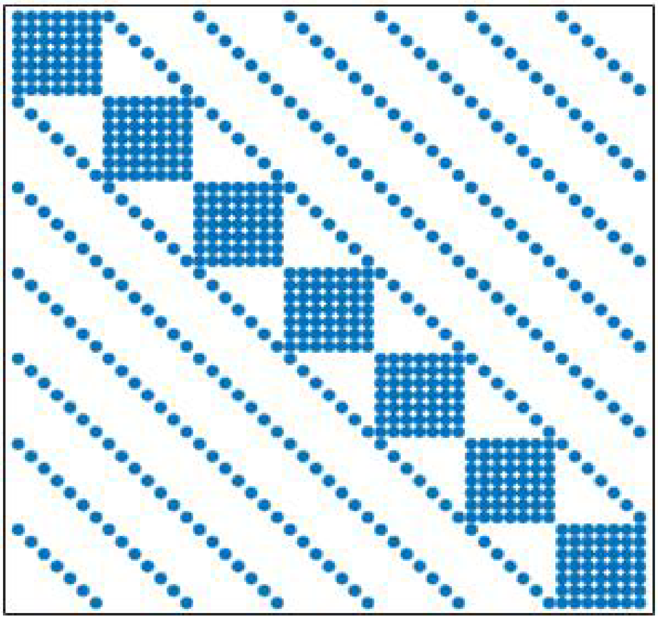

Рисунок 1. – Структура матрицы спектрального метода Чебышева для двумерного уравнения Пуассона в прямоугольной области с однородными краевыми условиями

В отличие от разностных и конечно-элементных методов матрицы спектральных моделей имеют более сильную зависимость числа обусловленности от количества узлов сетки, $K_A = O(N^4)$. Кроме того, структура матриц спектральных методов характеризуются меньшей степенью разреженности. Отмеченные недостатки спектральных методов, как правило, компенсируются их высокой точностью, которая допускает использование относительно грубых сеток. Тем не менее реализация спектральных методов составляет отдельную проблему.

Эффективность использования стандартных прямых методов решения систем алгебраических уравнений (2) с матрицами вида (3), несмотря на их разреженность, практически ничем не отличается от решения систем с полными матрицами. При использовании итерационных методов основная проблема связана с выбором переобусловливателя в силу быстрого роста числа обусловленности матрицы системы с увеличением числа узлов сетки и, как следствие, практической невозможностью применения явных итерационных алгоритмов для данного класса задач.

Стоит отметить, что к матрицам аналогичной структуры приводит спектральный метод Чебышева применительно к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающей динамику встречного взаимодействия световых волн в оптоволоконных усилителях [5]:

$$M\frac{dE}{dz} = -[\gamma - G(E)]E\,,\ -1 < z < 1\,, \tag{4}$$

где $E = (E_1, E_2, ..., E_n)^T$.

Ниже представлены результаты сравнения эффективности стандартных прямых и итерационных методов решения систем линейных алгебраических уравнений с матрицей такого вида и возможности ускорения методов решения данных задач при использовании графических процессоров.

Сравнение эффективности прямых и итерационных методов

Несмотря на разреженную структуру, матрица двумерной спектральной модели в процессе LU декомпозиции приводит к практически полным треугольным матрицам. По этой причине вычислительная сложность стандартной процедуры метода Гаусса по порядку величины близка к вычислительной сложности обработки полных матриц. В силу отмеченных обстоятельств представляет интерес поиск подходящих итерационных методов реализации спектральных моделей данного типа.

Как уже отмечалось выше, число обусловленности матрицы спектральной модели имеет сильную зависимость от числа узлов сетки по каждому направлению, $K_A = O(N^4)$, что определяет как минимум квадратичный рост числа итераций при увеличении N для явных итерационных методов. Неплохие результаты в плане ускорения сходимости дает использование переобусловливателя в виде матрицы P, полученной в результате конечно-элементной или конечно-разностной аппроксимации рассматриваемой дифференциальной задачи (см., например, [6]). Для данного типа переобусловливателя $K_{P^{-1}A} = O(N^2)$. В случае спектрального метода Чебышева аналогичные по порядку величины результаты дает использование диагонального переобусловливателя Якоби, несомненным достоинством которого является то, что он не требует дополнительных вычислительных затрат по сравнению со стандартной явной итерационной процедурой. В ряде случаев представляется перспективным использование блочного метода Якоби, когда для построения переобусловливателя вместо диагонали системной матрицы используются ее блочно-диагональная часть. В частности, блочный метода Якоби показал существенное преимущество при решении краевых задач для нелинейной системы (4).

Для выяснения вопроса о наиболее эффективном способе реализации спектральной модели (2), (3) для краевой задачи (1) рассмотрим штатный набор функций Matlab, предназначенных для решения систем линейных алгебраических уравнений с помощью прямых и итерационных методов. Представленные на рисунке 2 результаты сравнения показывают, что с увеличением числа узлов сетки преимущества итерационных методов становится все более очевидным.

Среди итерационных методов наиболее привлекательные результаты по числу итераций демонстрирует стабилизированный метод бисопряженных градиентов с переобусловливателем в виде неполной LU-факторизации. Использование диагонального переобусловливателя Якоби требует большего числа итераций, однако в данном случае за счет минимальной вычислительной сложности отдельной итерации общее время решения задачи оказывается минимальным. Стабилизированный метод сопряженных градиентов с переобусловливателем Якоби на порядок превосходит прямой метод при размерности сетки в 80 узлов по каждому направлению.

Для задачи встречного взаимодействия волн (4) использование итерационного метода обобщенных невязок с блочным переобусловливателем Якоби также дает многократное превосходство в эффективности в сравнении с прямым методом уже для случая системы шести уравнений и N > 10.

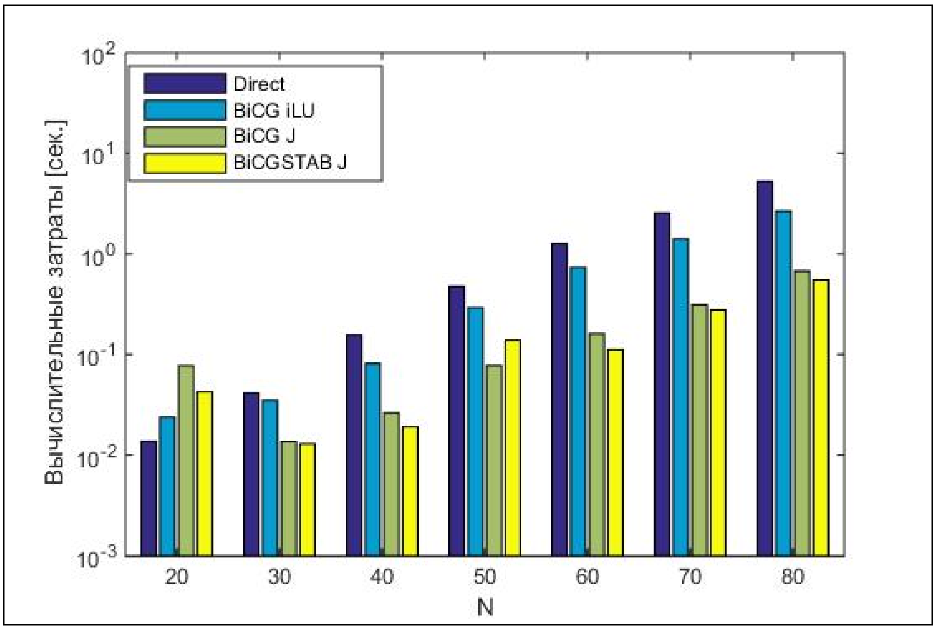

Рисунок 2. – Время реализации спектральной модели с помощью прямого (Direct) и итерационного метода бисопряженных градиентов (BiCG) с переобусловливателем Якоби (J) и неполной LU факторизации (iLU) в зависимости от числа узлов сетки

Рассмотрим возможности ускорения итерационного метода бисопряженных градиентов при реализации на графических процессорах.

Эффективность реализации итерационных методов на графических процессорах

Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений сводятся к последовательности операций умножения больших разреженных матриц на вектор, а также сложение и скалярное умножение векторов. Для оценки потенциальных возможностей ускорения итерационных алгоритмов сравним эффективность использования графических процессоров при умножении матрицы на вектор в зависимости от размерности матрицы. Сравним также производительность процессоров при выполнении умножения полных и разреженных матриц. Результаты численных экспериментов для разных аппаратных платформ представлены в таблице.

Таблица. – Ускорение производительности умножения матрицы на графическом процессоре

	GeForce GT 555M (i5-2410M 2.3 GHz)	GeForce GTX 650 (i5-3570 3.4GHz)	GeForce GTX 960 (AMD FX4350 4.2 GHz)
Full	1.9	2.1	12.3
Sparse	1.6	1.9	14.0

Заметим, что ускорения матричных операций для класса разреженных матриц близки к аналогичным показателям для полных матриц. Однако производительность при выполнении операций умножения для разреженных матриц примерно в четыре раза ниже, чем в случае полных, что, по-видимому, связано с дополнительными накладными расходами при обработке разреженных матриц. Зависимости производительности умножения матрицы на вектор от размерности M представлены на рисунке 3. В качестве разреженной матицы использована пятидиагональная матрица Пуассона. Умножение данной матрицы на вектор требует 10N операций умножения и сложения чисел с плавающей запятой. Для полных матриц вычислительные затраты составляют $2N^2$ арифметических операций. Для сравнения производительности оценивалась скорость выполнения арифметических операций с плавающей запятой в секунду (FLOPS). Представленные на рисунке 3 результаты получены на системе графического процессора GeForce GT 555M и CPU i5-2410M 2.3 GHz. Аналогичные результаты наблюдаются и при умножении матрицы двумерной спектральной модели уравнения Пуассона.

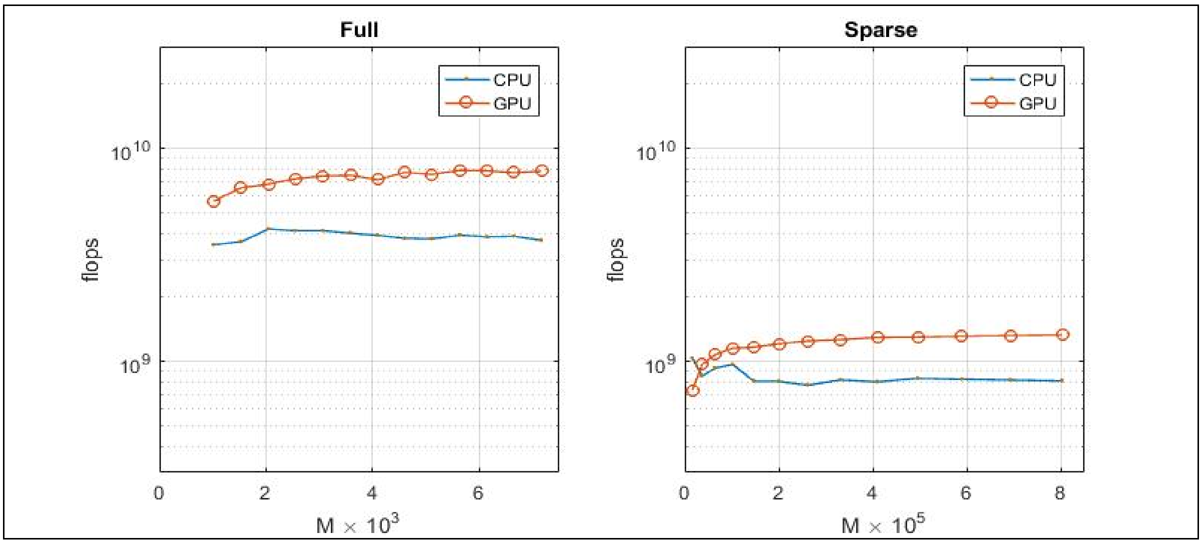

Рисунок 3. – Производительность процессоров GPU GeForce GT 555M и CPU i5-2410M 2.3 GHz при умножении полных и разреженных матриц на вектор

Представленные результаты позволяют ожидать, что реализация итерационных методов на графических процессорах бюджетного сегмента может по эффективности многократно превосходить соответствующие показатели основного процессора. Для примера на рисунке 4 представлены результаты сравнения зависимости времени итерационной реализации спектральной модели от размерности сетки.

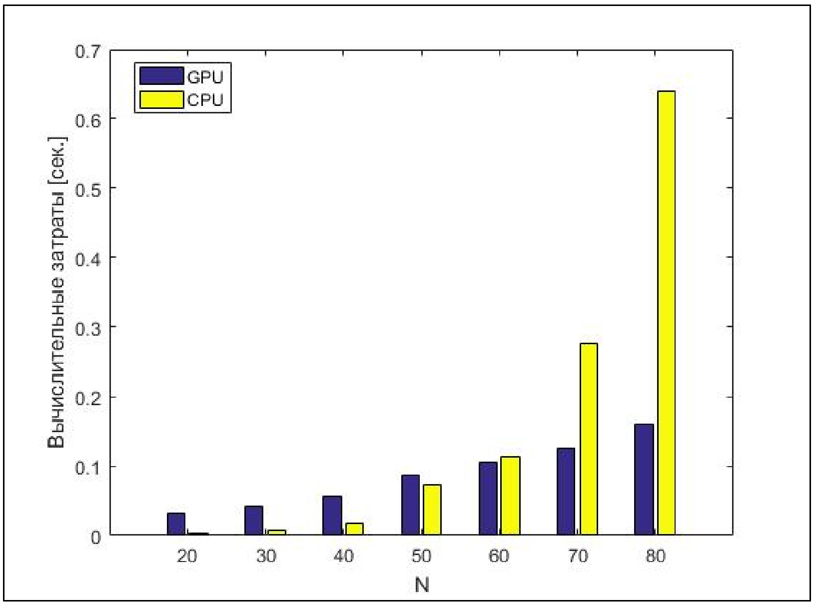

Рисунок 4. – Временные затраты на итерационную реализацию спектрального метода

В рассмотренном случае использован стабилизированный метод бисопряженных градиентов с переобусловливателем Якоби, реализованный на самой эффективной из рассмотренных платформ GeForce GTX 960 / AMD FX4350 4.2 GHz. Как видно из представленных результатов сравнения, эффективность реализации спектрального метода на GPU возрастает с ростом числа узлов сетки и при размерности сеточной области 80×80 примерно в четыре раза превосходит эффективность основного процессора. Для больших размерностей сетки ускорение может быть еще значительнее в силу роста производительности матричных операций на GPU с ростом их размерности.

Заключение

Итерационные методы при надлежащем выборе переобусловливателя имеют заметное преимущество по сравнению со стандартными прямыми методами при реализации спектральных методов Чебышева решения многомерных краевых задач для уравнений в частных производных и систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Кроме того, итерационные алгоритмы реализации спектральных методов в среде Matlab с использованием технологии CUDA позволяют существенно повысить эффективность вычислений на графических процессорах.

Примечательно, что производительность основного процессора при работе с большими разреженными матрицами замедляется с ростом размерности матриц, в то время как для графических процессоров, напротив, именно при максимальных размерностях реализуются преимущества в скорость вычислений. Представленные в работе результаты демонстрируют примерно четырехкратное ускорение итерационных методов при вычислении на графическом процессоре с разреженными матрицами размерностью $N = 10^3 \div 10^4$.

Полученные оценки производительности показывают, что для современных GPU бюджетного сегмента потенциально достижимы ускорения на порядок и более. Что касается прямых методов, то для рассмотренного класса задач здесь следует отметить перспективность блочных алгоритмов, программная реализация которых пока не получила широкого распространения.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sharma, G. MATLAB®: a language for parallel computing / G. Sharma, J. Martin // International Journal of Parallel Programming. – 2009. – Т. 37, № 1. – С. 3–36.

2. Parallel computing toolbox [Электронный ресурс]. – Официальный сайт компании Mathworks. – Режим доступа: http://www.mathworks.com/products/parallel-computing/index.html.

3. Boyd, J. P. Chebyshev and Fourier spectral methods / J. P. Boyd. – New York : DOVER Publications, Inc., 2000. – 665 p.

4. Weideman, J. A. A MATLAB differentiation matrix suite / J. A. Weideman, S. C. Reddy // ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS). – 2000. – Т. 26, №. 4. – С. 465–519.

5. Волков, В. М. О спектральных методах численного анализа встречного взаимодействия оптических волн в нелинейной среде / В. М. Волков, Ю. В. Буяльская // Весн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізіка. Матэматыка. – 2015. – № 2. – С. 62–68.

6. Canuto, C. Preconditioned minimal residual methods for Chebyshev spectral calculations / C. Canuto, A. Quarteroni // Journal of Computational Physics. – 1985. – Т. 60, № 2. – С. 315–337.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 10.05.2017

Volkov V.M., Buyalskaya Yu.V., Vrubleuski I.D., Kalenchanka A.P. **Direct and Iterative Algorithms Implementing Spectral Chebyshev Methods for Multidimensional Boundary Value Problems Using GPGPU Technology in Matlab**

A comparative numerical analysis of the efficiency of standard direct and iterative algorithms implementing Chebyshev spectral methods for multidimensional boundary value problems using GPGPU technology in the Matlab is presented. It is shown that the iterative methods of the conjugate gradients type with Jacobi preconditioners outperform the direct methods at even comparatively small grid size. Moreover, when using GPU, there is 2-4 times acceleration of iterative methods, and the advantages in the implementation of sparse matrix arithmetics increase with the increase in their dimension.