

УДК 519.6

О. М. Хіміч, д-р фіз.-мат. наук, професор, член-кор. НАН України,

О. А. Ніколаєвська, канд. фіз.-мат. наук,

Т. В. Чистякова, канд. фіз.-мат. наук, с. н. с.

Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, м. Київ

ПРО ДЕЯКІ СПОСОБИ ПІДВИЩЕННЯ ТОЧНОСТІ КОМП'ЮТЕРНИХ ОБЧИСЛЕНЬ

Досліджуються різні способи використання багаторозрядної комп'ютерної арифметики. Наведено результати реалізації паралельного алгоритму сингулярного розвинення матриці з підвищеною точністю за допомогою функцій бібліотеки GMP на MIMD-комп'ютері.

Ключові слова: *паралельний алгоритм SVD-розвинення, підвищена розрядність, бібліотека GMP.*

1. Вступ. Одним з найважливіших напрямків використання комп'ютерів, які забезпечують науково-технічний прогрес, є їх застосування для комп'ютерного моделювання процесів, більшість з яких зводиться або мають своїм проміжним етапом розв'язування задач обчислювальної математики. Відомо, що незважаючи на досить повне теоретичне обґрунтування методів розв'язування цих задач, в ряді випадків отримують комп'ютерні розв'язки, що не мають фізичного сенсу. Проблеми достовірності комп'ютерних розв'язків задач знаходяться у центрі уваги багатьох спеціалістів з часів розробки перших комп'ютерів та прикладного програмного забезпечення [1–6].

Причин цього є декілька. По-перше, існує чисельне програмне забезпечення створювалося з припущенням того, що вихідні дані задані точно, а дослідження достовірності комп'ютерних результатів здебільшого покладається на користувачів, які розв'язують свої практичні задачі. Але при розв'язуванні прикладних задач їхні математичні моделі мають, як правило, наближені дані та похибки, пов'язані з обмеженою розрядністю чисел, що зберігаються в пам'яті комп'ютера, і в результаті заокруглень під час виконання арифметичних операцій.

Слід також зазначити, що методи класичної математики можуть бути непридатні для комп'ютерної реалізації. Так, наприклад, класичні методи визначення такого фундаментального поняття лінійної алгебри як ранг матриці непридатні з обчислювальної точки зору для реалізації з обмеженою розрядністю обчислень. У цьому випадку слід використовувати визначення рангу матриці, яка враховує наближений характер машинних моделей задач [5], а для його обчислення — стійкі з обчислювальної точки зору алгоритми, зокрема алгоритм сингулярного розвинення матриць.

Інший приклад пов'язаний з виродженістю матриць. Реалізація класичного визначення виродженості матриці — рівність нулю її

визначника — в комп'ютерній арифметиці очевидно є неприйнятною (величезний обсяг комп'ютерних обчислень для матриць, які виникають на практиці призводить до неправильних результатів через похибки обчислень). У цьому випадку доцільно перевіряти матрицю на виродженість в межах машинної точності, використовуючи в арифметиці з плаваючою комою співвідношення

$$1.0 + r(\text{cond}A) = 1.0, \quad (1)$$

де $r(\text{cond}A) = 1 / \text{cond}A$, $\text{cond}A$ — число обумовленості матриці [5, 6]. Виконання цієї умови, яка виконується в арифметиці з плаваючою точкою, означає, що матриця має повний ранг у межах машинної точності. Для забезпечення достатньої точності обчислень необхідно продовжити дослідження з використанням підвищеної розрядності обчислень.

Отже, однією з актуальних проблем отримання достовірних комп'ютерних результатів математичного моделювання є створення засобів розв'язування задач з довільною комп'ютерною розрядністю.

2. Деякі засоби реалізації високоточної арифметики. Проблеми підвищення точності комп'ютерних обчислень стали досліджувати ще в середині минулого століття. В Інституті кібернетики імені В. М. Глушкова в 1965 році вперше в світі на комп'ютерах серії MIP було реалізовано виконання обчислень з довільною розрядністю. Причому оператор «розрядність» можна було використовувати в будь-якому місці програми [7].

З появою комп'ютерів паралельних архітектур стало можливим розв'язувати задачі математичного моделювання надвеликих розмірів і проблеми використання підвищеної комп'ютерної розрядності стали дуже актуальними.

У серпні 2008 року в напрямку підвищення розрядності обчислень був зроблений важливий крок, пов'язаний з публікацією стандарту IEEE 754-2008, який замінив раніше діючий стандарт обчислень з плаваючою комою IEEE 754-1985. Стандарт 1985 року передбачав 2 типи чисел з плаваючою комою: одинарної (32-розрядні) і подвійної (64-розрядні) точності. У стандарті IEEE 754-2008 однією з перших апаратних реалізацій став арифметичний співпроцесор Intel 8087, в якому додатково використовується внутрішній «розширений» 80-розрядний формат з 64-розрядною мантисою. Це спонукало до створення апаратних та програмних засобів для реалізації обчислень з підвищеною точністю [8].

Наведемо декілька доступних у наш час пакетів для високоточної арифметики з плаваючою комою:

- ARPREC: підтримує довільну розрядність, з безліччо алгебраїчних та трансцендентних функцій C++ та Fortran-90 [8].
- GMP: підтримує високоточні обчислення з плаваючою комою для цілих та раціональних чисел, розповсюджується під ліцензією GNU на Free Software Foundation [9].

- MPFR [10]: підтримує підвищену точність обчислень з плаваючою комою з правильним закругленням на основі GMP.
- MPACK: бібліотека програм для реалізації обчислень лінійної алгебри з довільною розрядністю до складу якої входять бібліотеки MBLAS та LAPACK, створені на основі версій BLAS та LAPACK, відповідно [11].
- Matlab, Maple [12, 13]: пакети програм математичних обчислень, які реалізують символічну арифметику, забезпечують обчислення з довільною розрядністю за допомогою функцій MPFR та GMP.

В Інституті кібернетики імені В. М. Глушкова також проводяться роботи по створенню засобів розв'язування задач з довільною розрядністю на комп'ютерах різних архітектур. Так, для розв'язування задач з підвищеною точністю розроблено комп'ютерні засоби на базі ПЛІС [14], які реалізують як двійкову, так і десяткову арифметику. При цьому розрядність даних може бути 128 біт і більше. Також створено бібліотеку програм для розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь зі щільними матрицями з довільною розрядністю для однопроцесорних та паралельних комп'ютерів [15]. Для покращення продуктивності двоключової криптографії створено швидкі алгоритми множення багаторозрядних чисел [16].

3. Реалізація паралельного алгоритму сингулярного розв'язування матриці з підвищеною точністю. Розглянемо розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) $Ax = b$, де $A = (a_{ij})$, $i, j = 1 \div n$, $n = 3w + 1$, $w = 1, 2, \dots$;

$$a_{ii} = n - i, a_{ij} = n + 1 - \max(i, j), n = 1000.$$

Тобто щільна симетрична матриця A має вигляд:

$$A = \begin{pmatrix} n-1 & n-1 & n-2 & \dots & 2 & 1 \\ n-1 & n-2 & n-2 & \dots & 2 & 1 \\ n-2 & n-2 & n-3 & \dots & 2 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 2 & 2 & 2 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Елементи правої частини системи обчислюються за формулами:

$$b = \{b\}_1^n, b_i = n - i, \text{ якщо } i \leq 2; b_i = n + 1 - i, \text{ якщо } i > 2.$$

Точний розв'язок системи: $x = (0, 1, 0, \dots, 0)^T$.

Експериментальне дослідження створеного алгоритму проводились на інтелектуальній робочій станції Інпарком-256 [6]. Для знаходження узагальненого розв'язку системи було використано паралельний алгоритм сингулярного розв'язування матриці (SVD-розв'язування) [6] з використанням подвійної розрядності та розрядності 128 (за допомогою функцій

GMP). *SVD*-розвинення матриці A реалізується за формулою $A = U\Sigma V^T$ за допомогою послідовних двосторонніх ортогональних перетворень Хаусхолдера та *QR*-алгоритму з неявними зрушеннями. Узагальнений розв'язок отримується за допомогою перетворень: $x^\# = V(\Sigma^\# c)$, $c = U^T b$, де $\Sigma^\#$ — псевдообернена матриця сингулярних чисел.

Далі наведено фрагмент протоколу розв'язування задачі на різній розрядності:

Data :

- number of matrix's rows = 1000
- number of matrix's columns = 1000
- number of the right-hand side = 1

Method singular value decomposition of a general matrix

Double precision

The first 12 components of solution (vector 1) are:

5.6333892e-10 1.0000000e+00 9.4955344e-10 -3.9295606e-10
3.4584592e-11 -3.1325660e-11 -5.2191194e-11 1.0333934e-10
4.0820428e-11 1.2171034e-10 -1.3408585e-10 -1.3067941e-10

Error estimations: 4.99145e-08

Number of processors: 256

Time of the problem solving: 1.90184e+00

Precision: 128

The first 12 components of solution (vector 1) are:

4.542023653172171029613412372708540734237e-10
9.999999988133053712363884862610545339883e-1
8.596337855248521920949042511303410682999e-10
-5.778745545522837613719304657057155162560e-10
2.478842441000457028969062655076884178892e-10
-4.614732005746163711772859280407039572994e-11
-1.332058817740914894055177822937008106361e-10
2.475147353295835911231063091604476666731e-10
-1.413511305470471351429083270818254995334e-10
4.646294881316116625025682001215166728271e-11
1.579344790735691761620889129173387714917e-10
-1.321933565365172523005909115249671919661e-10

Error estimations: 4.99145e-08

Number of processors: 256

Time of the problem solving: 1.30108e+10

З лістингу ми бачимо, що використовуючи розрядність 128 отримано розв'язок з більшою точністю ніж з використанням подвійної розрядності, але час розв'язування задачі при цьому значно збільшився.

На рисунку показано як змінюється час розв'язування СЛАР різного порядку паралельним алгоритмом *SVD*-розвинення з різною розрядністю, використовуючи на 256 процесах.

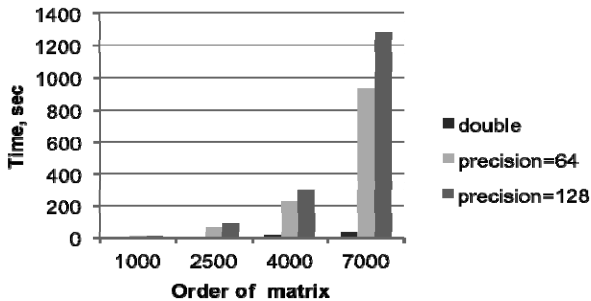


Рисунок. Залежність часу розв'язування задач від розрядності

Висновки. Досвід використання різних способів реалізації обчислень з підвищеною розрядністю показав:

- 1) для забезпечення достовірності результатів розв'язування погано обумовлених систем доцільно використовувати підвищену розрядність;
- 2) реалізація обчислень за допомогою апаратних засобів потребує суттєвих фінансових затрат на придбання необхідних серверів, а реалізація обчислень з підвищеною точністю за допомогою програмних засобів значно збільшує час розв'язування задачі. Отже, необхідно виконувати обчислення з підвищеною розрядністю лише для задач, які потребують уточнення результатів розв'язування (можливо застосовувати змінну розрядність);
- 3) для платформи UNIX / Linux найбільш популярною бібліотекою для реалізації обчислень з підвищеною точністю є бібліотека GMP;
- 4) в Інституті кібернетики імені В. М. Глушкова створено бібліотеку програм для розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь зі щільними матрицями з довільною розрядністю для однопроцесорних та паралельних комп'ютерів. Проводяться роботи по розширенню цієї бібліотеки програмами для розріджених матриць.

Список використаних джерел:

1. Райс Дж. Матричные вычисления и математическое обеспечение. М.: Мир, 1984. 264 с.
2. Уилкинсон Дж. Х., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976. 389 с.
3. Воеводин В. В. Ошибки округлений и устойчивость в прямых методах линейной алгебры. М.: ВЦ МГУ, 1969. 153 с.
4. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980. 279 с.

5. Молчанов. И. Н. Машинные методы решения прикладных задач. Алгебра, приближение функций, обыкновенные дифференциальные уравнения. Киев: Наук. думка, 2007. 550 с.
6. Химич А. Н., Молчанов И. Н., Попов О. В. и др. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. К.: Наук. думка, 2008. 247 с.
7. Глушков В. М., Молчанов И. Н., Брусникин Б. Н. и др. Программное обеспечение ЭВМ МИР-1 и МИР-2. Численные методы. Киев: Наук. думка, 1976. Т. 1. 280 с.
8. Bailey D. H., Hida Y., Li Y., Thompson B. ARPREC: An arbitrary precision computation package, 2002. <http://www.davidhbailey.com/dhbpapers/arprec.pdf>
<http://crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/mpdist>
9. The GNU multiple precision library. <https://gmplib.org>
10. The GNU MPFR Library. <http://www.mpfr.org>
11. MPACK. Multiple precision arithmetic BLAS (MBLAS) and LAPACK (Mlapack). <http://mplapack.sourceforge.net/>
12. Matlab Multiple precision arithmetic. <http://www.advanpix.com/documentation/users-manual>.
13. Maple soft. <https://www.maplesoft.com/products/maple>.
14. Опанасенко В. М., Хімич О. М. Лісовий О.М., Чистякова Т.В. Розв'язання задач с підвищеною точністю обчислень. *Управляющие системы и машины*. 2011. № 1. С. 9–18.
15. Khimich A., Nikolaevskaya E., Chistyakova T. Programming with Multiple Precision. Springer-Verlag. Berlin, 2012. 206 p.
16. Задірака В. К., Олексюк О. С. Комп'ютерна арифметика багаторозрядних чисел. Київ, 2003. 264 с.

The different ways of using multi-computer arithmetic. The results of the implementation of the parallel algorithm singular matrix expansion with high accuracy using library functions on MIMD-GMP computer.

Key words: *parallel algorithm for SVD-decomposition, precision, GMP library.*

Одержано 16.02.2017