КЛЕТОЧНЫЙ АСИНХРОННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НА ГПУ

А.П. Карпенко, М.П. Погосский

Введение. Численное решение краевых задач для уравнений в частных производных (ДУЧП) является одной из центральных проблем математического моделирования. В силу высокой вычислительной сложности этих задач разработано большое число параллельных методов и алгоритмов их решения, ориентированных на различные классы параллельных вычислительных систем. В последние годы в связи с интенсивным внедрением в вычислительную практику графических процессорных устройств (ГПУ) значительное внимание уделяется разработке параллельных методов и алгоритмов, ориентированных на этот класс систем. Целью работы является исследование эффективности, так называемого клеточного асинхронного метода решения ДУЧП на ГПУ. В работе дана постановка задачи и описание указанного метода ее решения, приведена схема и результаты вычислительного эксперимента по исследованию погрешности метода с помощью имитационного моделирования. На основе результатов исследования обоснована целесообразность модификации метода, заключающаяся в периодической глобальной синхронизации асинхронных итераций. Рассматриваем используемую схему отображения алгоритма, реализованного модифицированного метода асинхронных итераций, на архитектуру ГПУ. Представляем результаты численных экспериментов на двух классах ГПУ. Формулируем основные результаты работы и перспективы ее развития.

Постановка задачи и схема метода. Рассматриваем для простоты записи одномерную модель распространения тепла в стержне в форме уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

при заданных граничных и начальных условиях.

Выполним дискретизацию задачи по пространству и времени с шагами h и t_h соответственно. Значения переменных x, t в узлах полученной сетки обозначим x_i, t_i , а значения непрерывной функции $U(x, t)$ обозначим $U(x_i, t_j)$. В результате ДУЧП (1) приобретает форму системы конечно-разностных уравнений

$$\frac{w_{i,j} - w_{i,j-1}}{t_h} - a^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0, \quad i = [1:m], \quad j = [1:l] \quad (2)$$

с нулевыми начальными и граничными условиями. Здесь m, l – числа шагов дискретизации по переменным x, t соответственно, $w_{i,j}$ – компоненты искомой разностной функции w_h .

Введем обозначение $q_h = \frac{t_h a^2}{h^2}$. Тогда система (2) приобретает форму системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$w_{i,j-1} = (1 + 2q_h)w_{i,j} - q_h w_{i+1,j} - q_h w_{i-1,j}, \quad i = [1:m], \quad j = [1:l]$$

или в матричной форме - вида

$$L_h W_h = U_h, \quad (3)$$

где L_h - разностный оператор, задающий отображение $L_h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$; U_h - сетевая функция.

В общем случае вид оператора L_h определяет используемый конечно-разностный шаблон. С точки зрения распараллеливания вычислений основным параметром шаблона является его степень соседства r - максимальное расстояние между центральным узлом шаблона и его периферийными узлами. Соседей узла (i, j) , в смысле используемого шаблона, называем окружением этого узла, а их число обозначаем a_h .

Рассматриваем итерационный клеточный локально-асинхронный метод решения СЛАУ (3). В работе [1], в котором рассматривается теория этого метода, изложение ведется в терминах клеточных нейронных сетей. Поэтому можно сказать, что целью нашей работы является исследование эффективности реализации клеточных нейронных сетей на ГПУ.

Каждому из узлов $w_{i,j}$ рассматриваемой конечно-разностной сетки ставим в соответствие клетку $w_i(j); i = [1:n], j = [1:l]$, динамику которой определяет итерационная формула вида

$$w_i(j) = w_i(j-1) - \frac{K}{h^2} (L_i(w_k(s_k(j))), k \in J) - u_i, \quad (4)$$

где $s_k(j), 0 \leq s_k(j) \leq j$ - задержка между текущим временем t_j и временем $t_{s_k(j)}$, которому соответствует состояние клетки w_k , принадлежащей окружению рассматриваемого узла $w_{i,j}$; J - набор a_h штук номеров клеток этого окружения; $K = t_h a_h^2$. Отметим, что ситуация $s_k(j) = j$ определяет синхронный клеточный метод.

Базовое свойство асинхронного метода состоит в том, что для продолжения итераций в данном узле сеточной области не нужно ожидать завершения итераций в соседних узлах.

Исследование погрешности метода. Для экспериментального исследования погрешности асинхронного метода разработана его C++ имитационная модель. Рассматриваем одномерную задачу теплопроводности для стержня, температура на концах которого равна 60 и 100 градусов. Используем конечно-разностную сетку с числом узлов $n = 100$ и трех точечный шаблон. В каждый момент времени t_j производим по 100 итераций. Моделирование асинхронности вычислений выполняем по следующей схеме.

С каждой из клеток $w_i(j), i = [1:n]$ связываем ее вес $v_{i,j}$, определяемый формулами

$$v_{i,j} = v_{i,j-1} + d_h(1 - V_{i,j-1}), \quad v_{i,j} < p;$$

$$v_{i,j} = v_{i,j-1} - d_h V_{i,j-1}, \quad v_{i,j} \geq p.$$

Здесь d_h - случайная величина равномерно распределенная в интервале $[0,01; D_h]$, p - величина порога. Полагаем, что обновление состояния клетки происходит только в том случае, когда ее вес превышает этот порог.

В качестве меры погрешности метода используем величины e_M, s_M - оценки математического ожидания (МО) и среднего квадратичного отклонения (СКО) максимальной ошибки разности решений задачи, полученных на указанном шаблоне методом конечных разностей и асинхронным методом. Некоторые результаты исследования иллюстрирует рисунок 1.

Рисунок 1 — Оценка МО погрешности метода e_M в функции величины порога p

Рисунок 1 показывает, что погрешность асинхронного метода может достигать неприемлемых величин. В результате возникает идея ограничить число асинхронных итераций для чего периодически проводить их глобальную синхронизацию. Далее рассматриваем только модифицированный указанным образом метод, называемый условно-асинхронным.

Отображение алгоритма на ГПУ. Условно-асинхронный клеточный метод реализован на архитектуре NVidia CUDA для трехмерной модели теплопроводности

$$\frac{\partial U(x, y, z, t)}{\partial t} = a^2 \left(\frac{\partial^2 U(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right), \quad (5)$$

аналогичной модели (1). Расчеты выполнены для кубического тела, грани которого имеют постоянные температуры 50, 60, 70, 100, 120 и 200 градусов соответственно. Начальные условия внутри границ приняты нулевыми.

С точки зрения эффективности реализации соответствующего алгоритма на ГПУ, ключевой проблемой является проблема оптимального разбиения клеток на блоки. В работе выполнен анализ эффективности двух вариантов такого разбиения [2]. Полагаем, что используется семи точечный шаблон и каждой клетке соответствует *CUDA*-нить.

Первый вариант использует разбиение, представленное на рисунке 2а. На рисунке 2б к клеткам, показанным на рисунке 2а, добавлены клетки, информационно связанные с ними. Преимуществами данного разбиения являются возможность использования блоков большого размера и минимальное число смежных клеток из соседних блоков. В то же время, разбиение обладает существенными недостатками: не позволяет в полной мере использовать преимущества блочного чтения из памяти; требует использования достаточно сложной индексации клеток; из-за асинхронности алгоритма клетки блока оказываются сильно подверженными влиянию краевых эффектов [2].

Второй вариант предполагает, что каждый из блоков представляет собой строку клеток по одному из измерений расчетной области (рисунок 3). Такое разбиение лишено всех недостатков первого варианта, но одновременно лишено и его преимуществ [2].

С целью ограничения периода асинхронного выполнения нитей в *CUDA*-программе, реализующей условно-асинхронный алгоритм, приняты следующие решения. Во-первых, число итераций в пределах каждого запуска блока ограничено величиной N , что ограничивает степень асинхронности метода. Во-вторых, производится барьерная синхронизация блоков, реализованная с помощью функции завершения выполнения всех нитей на ГПУ.

Рисунок 2 - К первому варианту разбиения клеток на блоки

Рисунок 3 — Ко второму варианту разбиения на блоки

Программная реализация алгоритма поддерживает два отображения условно-асинхронного алгоритма на ГПУ: 1) с использованием только глобальной памяти; 2) с использованием разделяемой памяти. В зависимости от модели используемого ГПУ и размерности расчетной сетки оптимальной может быть как первая, так и вторая реализации.

Первая реализация использует второй вариант разбиения. Строки блоков ориентированы вдоль оси z . Нить имеет одномерный адрес в блоке ($threadIdx.x$), а блок - двухмерный адрес в расчетной сетке ($blockIdx.x, blockIdx.y$). Таким образом, клетку в пространстве (x, y, z) и соответствующую нить идентифицирует тройка ($threadIdx.x, blockIdx.y, blockIdx.z$).

Вторая реализация также использует второй вариант разбиения и указанную выше идентификацию нитей. Отличия реализаций состоит в том, что в данном случае перед пересчетом состояний клеток нити копируют в разделяемую память предыдущие и текущие значения величин, определяющих эти состояния. Кроме того, в разделяемую память копируются текущие состояния клеток-соседей.

Вычислительный эксперимент выполнен на системе, состоящей центрального процессора и двух ГПУ *GeForce GTS250* и *GeForce GTX470*. Для оценки ускорения S , которое обеспечивает алгоритм и его программная реализация, он был реализован также на центральном процессоре системы. Все эксперименты выполнены на расчетной сетке $128 \times 128 \times 128$. Традиционно при параллельном решении ДУЧП эффективность алгоритма иллюстрируют зависимостью ускорения, которое он обеспечивает, от числа узлов используемой расчетной сетки. Для асинхронного алгоритма более показательным является ускорение в функции параметра K (формула (4)), который определяют скорость сходимости алгоритма, т.е. число итераций, необходимых для перехода клеточной сети в устойчивое состояние (которое и соответствует решению задачи). Указанную зависимость иллюстрируют рисунки 4, 5, первый из которых получен с помощью первой программной реализации и ГПУ *GeForce GTS250*, а второй - с помощью второй реализации и того же ГПУ. На указанных и

Рисунок 4 - Ускорение вычислений в функции параметра K : реализации 1; ГПУ *GeForce GTS250*

Рисунок 5 - Ускорение вычислений в функции параметра K : реализации 2; ГПУ *GeForce GTS250*

последующих рисунках треугольниками, ромбиками, квадратиками и крестиками помечены кривые для $N=1,5,10,15$ соответственно.

Рисунки показывают, как и следовало ожидать, значительно более высокую эффективность вычислений при использовании разделяемой, а не глобальной памяти. В реализации 1 ускорение слабо зависит от числа итераций N . Во второй реализации с увеличением N растет доля вычислений, в которых глобальная память не используется. Это обстоятельство обеспечивает более высокое ускорение реализации 2 по сравнению с первой реализацией. Однако с ростом величины N возрастает число итераций, необходимых для перехода сети в устойчивое состояние. По этой причине при $N > 10$ ощутимый прирост ускорения не наблюдается. Существует достаточно широкий диапазон значений K , при которых ускорение меняется не слишком существенно.

Аналогичные результаты, полученные при использовании ГПУ *GeForce GTX470*, иллюстрируют рисунки 6, 7. Рисунки показывают, что первая реализация обеспечивает при $K \in [0,01; 0,08]$ и всех рассматриваемых числах итераций N ускорение в диапазоне от примерно 20 до 110. Вторая реализация в тех же условиях дает ускорение от 20 до 130.

Заключение. В работе с помощью имитационной модели выполнено исследование эффективности асинхронного клеточного метода решения ДУЧП. На основе результатов исследования предложена модификация этого метода, предполагающая регулярную глобальную синхронизацию вычислений. Выполнено две *CUDA*-реализации соответствующего алгоритма, одна из которых предполагает использование только глобальной памяти ГПУ, а другая - разделяемой памяти. Проведено широкое экспериментальное исследование эффективности предложенной модификации метода, соответствующего алгоритма и указанного программного обеспечения. Результаты исследования показывают перспективность развития асинхронного клеточного метода решения ДУЧП на ГПУ.

В продолжении работы планируется исследование эффективности метода в функции других его свободных параметров и, в частности, в функции размерности расчетной сетки.

Рисунок 6 Ускорение вычислений в функции параметра K : реализации 1; ГПУ *GeForce GTX470*

Рисунок 7 Ускорение вычислений в функции параметра K : реализации 2; ГПУ *GeForce GTX470*

ЛИТЕРАТУРА:

1. Б.Б. Нестеренко, М.А. Новотарский Локально-асинхронный метод решения уравнений математической физики на клеточных нейронных сетях // «Компьютерное моделирование и интеллектуальные системы», сборник научных трудов, 2007, с.296 – 307.
2. А.Е. Алексеенко, А.М. Казённов Реализация клеточных автоматов «игра Жизнь» с применением технологий CUDA и OpenCL // Компьютерные исследования и моделирование, 2010, Т.2, №3, с. 323–326.