

AlgoWiki: изучение разных вариантов одного численного метода и другие проблемы

А.В. Фролов¹, А.С. Антонов²

Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки

Институт вычислительной математики им. Г.И.
Марчука Российской академии наук¹,

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования «Московский государственный
университет имени М.В.Ломоносова»²

Проблемы, возникающие при измерениях производительности

Предыстория: схема «чёрного ящика».

Предполагалось, что для измерения производительности **не нужно непосредственно считать количество операций**, достаточно знать затраченное время и теоретическую оценку количества операций

Проблемы, возникающие при измерениях производительности

2016г.: «зашкаливание» в QR-разложении методом Хаусхолдера производительности на разовом тесте.

Оказалось, что тестовая матрица слишком простой структуры.

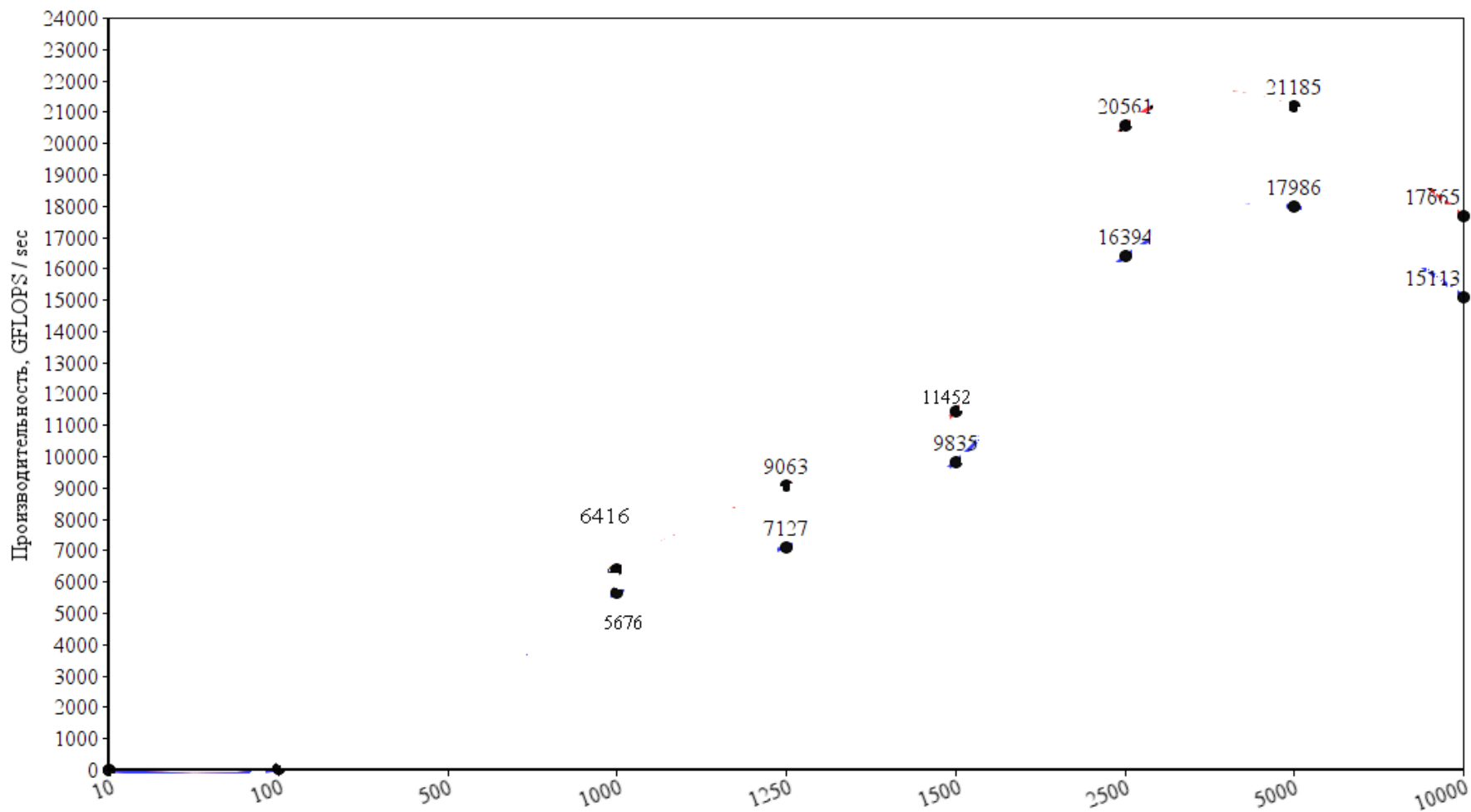
Проблемы, возникающие при измерениях производительности

2018-2019гг.: тестирование по случайным матрицам. Хаусхолдер.

Matrix	Cores	Time (sec)	SpeedUp	Perfomance (GFLOPS)
4096	1	6.865000	1.000000	6.673414
4096	2	3.576000	1.919743	12.811237
4096	4	1.971000	3.483004	23.243523
4096	8	1.059000	6.482531	43.260609
4096	16	0.834000	8.231415	54.931636
4096	32	0.627000	10.948963	73.066961
4096	64	0.750000	9.153333	61.083979
8192	1	113.308000	1.000000	3.234581
8192	2	70.605000	1.324816	5.190905
8192	4	47.573000	2.381771	7.704031
8192	8	31.179000	3.623653	11.810998
8192	16	15.005000	7.551350	24.425450
8192	32	4.302000	26.338447	85.193834
8192	64	2.098000	54.007626	174.692029
16384	1	1445.902000	1.000000	2.027821
16384	2	662.908000	2.181150	4.422983
16384	4	453.624000	3.187446	6.463571
16384	8	303.797000	4.912895	9.4056909
16384	16	147.894000	9.777007	19.826024
16384	32	60.754000	23.799289	48.260707
16384	64	26.527000	54.506804	110.530064
32768	1	18757.072000	1.000000	1.250528
32768	2	9378.536000	2.000000	2.501056
32768	4	4689.268000	4.000000	5.002113
32768	8	2344.634000	8.000000	10.004226
32768	16	1172.317000	16.000000	20.010452
32768	32	642.553000	30.221478	36.504768
32768	64	275.257000	67.143851	85.215809

Проблемы, возникающие при измерениях производительности

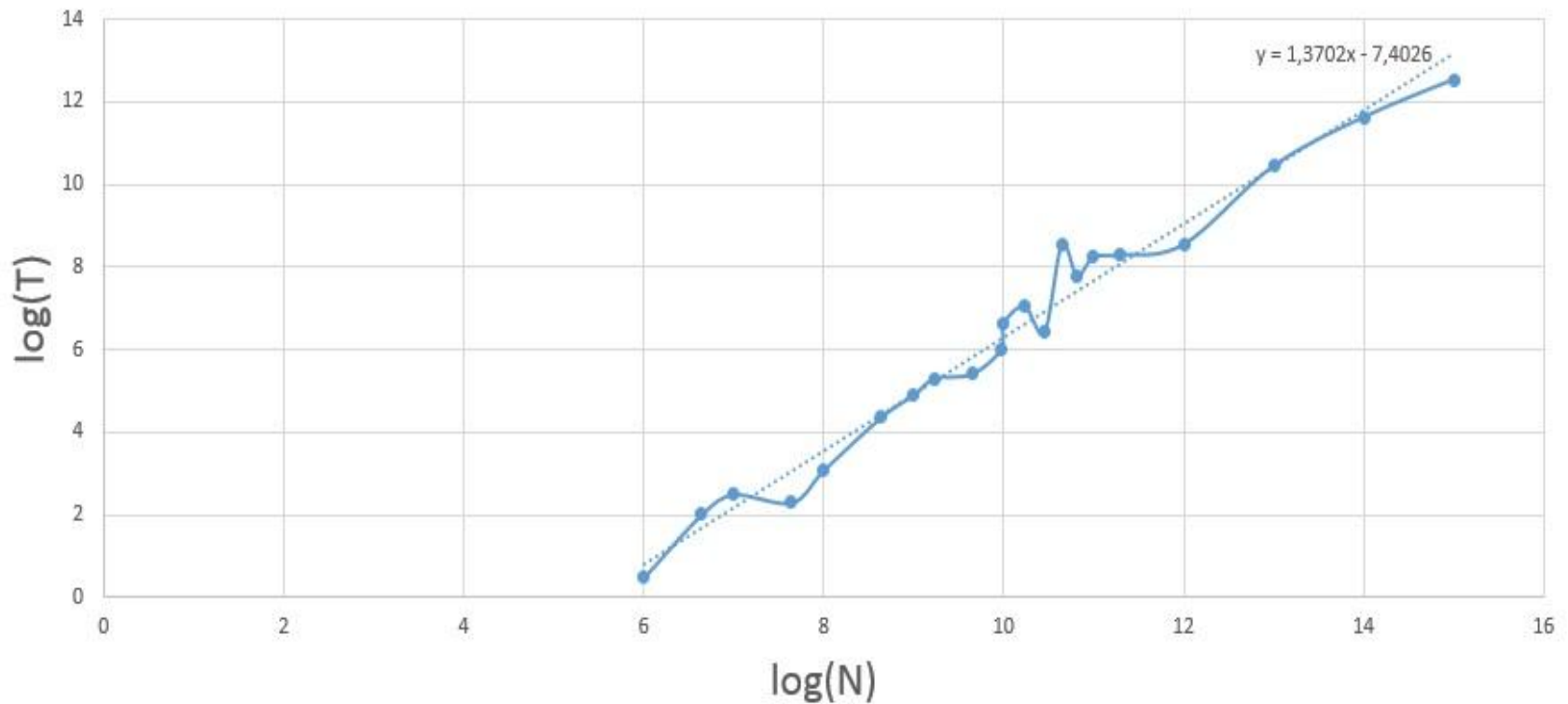
2018-2019гг.: тестирование по случайным матрицам. Спектральная задача на графических ускорителях. По абсциссе размеры задачи.



Проблемы, возникающие при измерениях производительности

2018-2019гг.: тестирование по случайным матрицам. Спектральная задача, кластерная архитектура.

Зависимость производительности от размеров матрицы при $N > 64$



Проблемы, возникающие при измерениях производительности

С чем связаны колебания в спектральном случае?

С тем, что на данных размерах сходимость отличается (коэффициентом при n) от среднестатистической сходимости ?

Или это реальные показатели «качества распараллеливания» на данной вычислительной системе?

Проблемы, возникающие при измерениях производительности

Вывод: подход к программе как к «чёрному ящику» при замерах в данном случае не годится. Нужно брать не оценку количества итераций/операций, а вычислять её, забираясь в саму программу.

Сравнение вариантов метода Якоби для спектральных задач

В сравнении с **остальными** методами:

- Важнейший недостаток – медленная сходимость
- Важнейшее преимущество – низкая относительная погрешность для малых собственных значений

Отсутствует в распространённых пакетах программ. Почему?

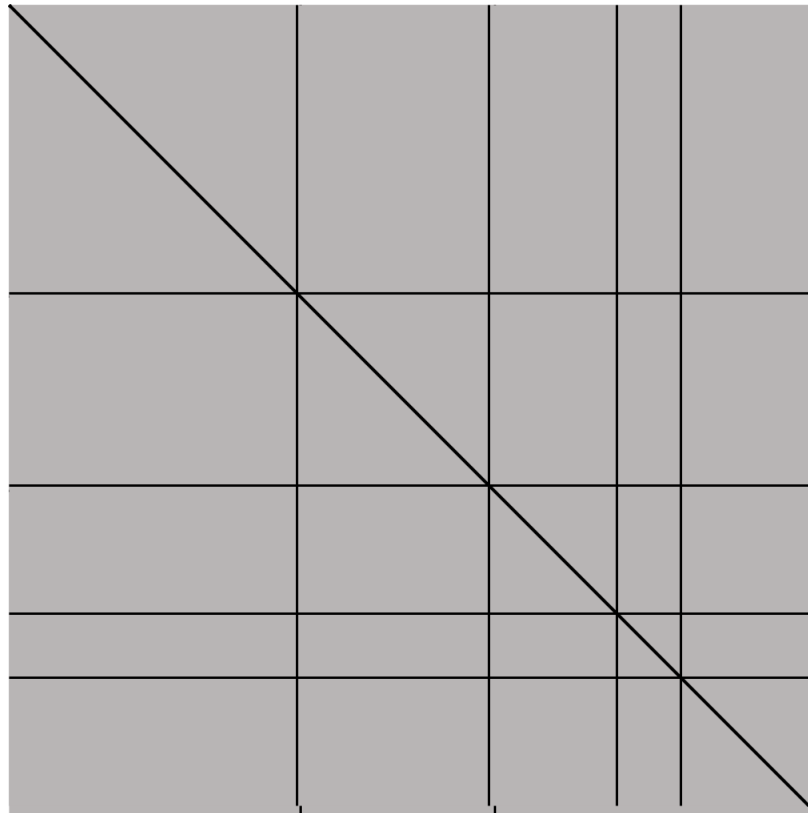
Исследование и сопоставление разных вариантов метода Якоби

Варианты решаемой задачи:

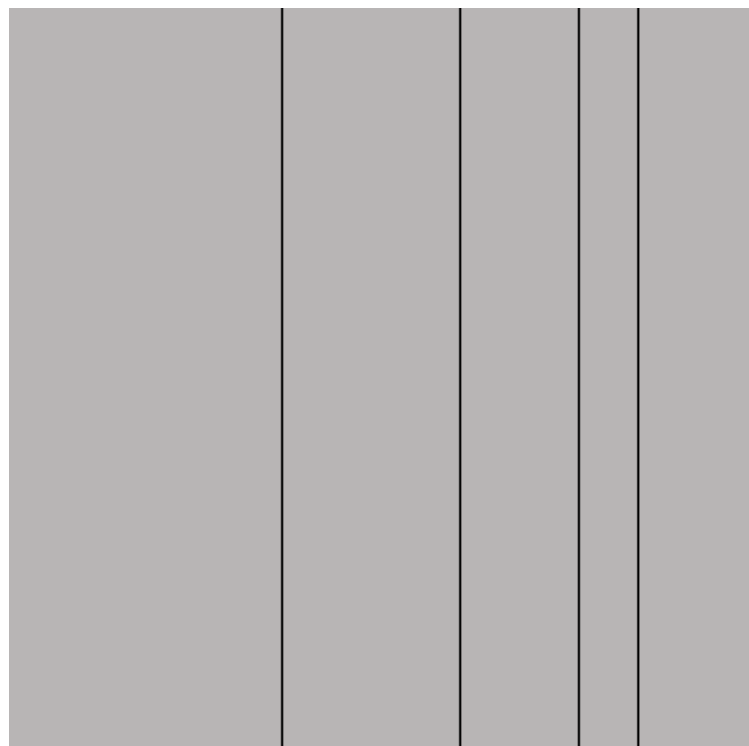
- Собственные значения для симметричных матриц
- Сингулярные значения для всех матриц

В учебниках (например, Дж.Деммеля): «легко распараллеливается» в варианте циклических вращений с барьерами

Собственные значения – двусторонние вращения



Сингулярные значения – односторонние вращения



В учебниках: «не требуется явного вычисления
в реальности: требуется явное вычисление
элементов матрицы G^*G ».

Метод Якоби с циклическим исключением и барьерами

Варианты решаемой задачи:

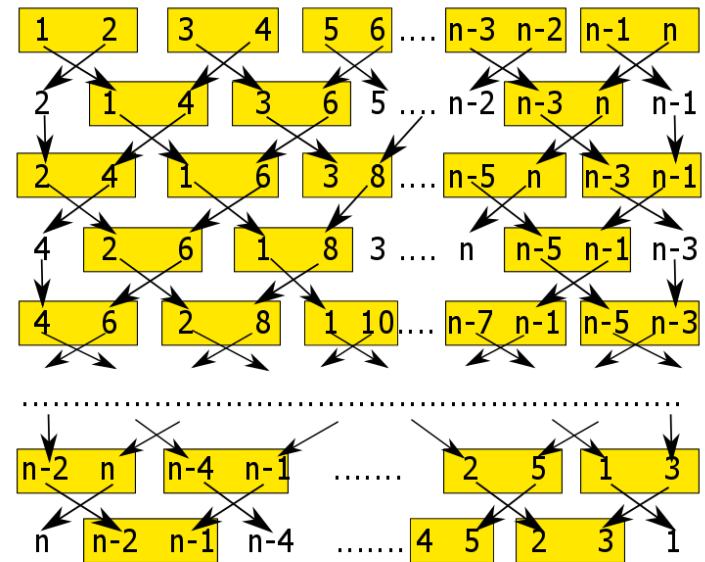
- Собственные значения для симметричных матриц
- Сингулярные значения для всех матриц

В реальности: между шагами итерации
требуется передать сопоставимый с
количеством арифметических операций
объём данных

Метод Якоби с циклическим исключением и барьерами

Выбор последовательности пар – «задача о расписании турнира»

При постоянных обменах
данными важными
становятся постоянные
маршруты их передачи



Метод Якоби для вычисления сингулярных чисел

В исходном варианте: на каждом макрошаге вычисляется $O(n)$ элементов матрицы G^*G , каждый по $O(n)$ операций (не менее логарифмического количества шагов на макрошаг)

Можно: отбросив «преимущество», в начале вычислять все $(n^2+n)/2$ элементов матрицы G^*G , каждый по $O(n)$ операций (не менее логарифмического количества шагов), а затем на каждом макрошаге они перевычисляются (каждый раз по $n^2/2$ элементов, поскольку $n/2$ элементов «обнуляются» принудительно).

Метод Якоби для вычисления сингулярных чисел

Таким образом, для параллельных реализаций «преимущество» метода Якоби, состоящее в неявности его исполнения, - перестаёт быть преимуществом, ибо **замедляет возможное быстроедействие.**

Де-факто метод Якоби для сингулярных чисел **более трудоёмок**, чем для собственных чисел симметричных матриц

Вывод: неявность выполнения двусторонних вращений не нужна.

Спасибо за внимание!