Мета роботи: розробити паралельну реалізацію алгоритму Гауса з допомогою технології MPI.

Теоретичні відомості

Системи лінійних рівнянь виникають у разі розв'язання великої кількості прикладних задач, описуваних диференційними або інтегральними рівняннями, а також системами нелінійних (трансцендентних) рівнянь. Вони можуть з'являтися, наприклад, у задачах математичного програмування, статистичного оброблення даних, апроксимації функцій, у разі розв’язання крайових задач для звичайних диференційних рівнянь методом кінцевих різниць тощо.

Матриці коефіцієнтів систем лінійних рівнянь можуть мати різну структуру й властивості. Матриці розв'язуваних систем можуть бути щільними, а їхній порядок може досягати декількох тисяч рядків і стовпців. У ході розв'язання багатьох задач можуть з'являтися системи, що мають симетричні додатно визначені стрічкові матриці з порядком у десятки тисяч і шириною стрічки в кілька тисяч елементів. І, нарешті, в процесі розв'язання низки задач можуть виникати системи лінійних рівнянь із розрідженими матрицями з порядком у мільйони рядків і стовпців.

Постановка задачі

Множину n лінійних рівнянь

$$\begin{cases} a_{0,0}\cdot x_0 + a_{0,1}\cdot x_1 + ... + a_{0,n-1}\cdot x_{n-1} = b_0 \\ a_{1,0}\cdot x_0 + a_{1,1}\cdot x_1 + ... + a_{1,n-1}\cdot x_{n-1} = b_1 \\ ... \\ a_{n-1,0}\cdot x_0 + a_{n-1,1}\cdot x_1 + ... + a_{n-1,n-1}\cdot x_{n-1} = b_{n-1} \end{cases}$$

називають системою лінійних рівнянь. У стислішому (матричному) вигляді система може бути представлена як $A\cdot x = b$, де A є дійсна матриця розміру $n\times n$, а вектор невідомих x і вектор вільних членів b містять по n елементів кожен.

Під задачею розв'язання системи лінійних рівнянь для заданих матриці A й вектора b зазвичай розуміють знаходження значень елементів вектора невідомих x, у разі підставлення якого всі рівняння системи перетворюються на тотожності.

Послідовний алгоритм Гауса

Метод Гауса є широко відомим прямим алгоритмом розв'язання систем лінійних рівнянь, в яких матриці коефіцієнтів є щільними. Якщо система лінійних рівнянь невироджена, то метод Гауса гарантує знаходження розв'язку з похибкою, обумовленою точністю машинних обчислень. У цьому підрозділі подається загальна характеристика методу Гауса, достатня для початкового розуміння роботи алгоритму, що й дозволяє розглянути можливі способи паралельних обчислень у разі розв'язання систем лінійних рівнянь. Повніше викладення алгоритму зі строгим обговоренням питань точності отримуваних розв'язків наведене, наприклад, у роботі [1].

Основна ідея методу полягає в приведенні матриці A за допомогою еквівалентних перетворень (таких, що не змінюють розв'язку початкової системи) до трикутного вигляду, після чого значення шуканих невідомих можуть бути отримані безпосередньо в явному вигляді. До еквівалентних перетворень належать:

- множення кожного з рівнянь на ненульову константу;
- перестановка рівнянь;
- додавання до деякого рівняння будь-якого іншого рівняння системи.

Метод Гауса включає послідовне виконання двох етапів. На першому етапі (прямий хід) початкова система лінійних рівнянь за допомогою послідовного виключення невідомих приводиться до верхнього трикутного вигляду $U \cdot x = c$, де матриця коефіцієнтів отримуваної системи має вигляд

$$U = \begin{pmatrix} u_{0,0} & u_{0,1n} & \dots & u_{0,n-1} \\ 0 & u_{1,1} & \dots & u_{1,n-1} \\ & & \dots & \\ 0 & 0 & \dots & u_{n-1,n-1} \end{pmatrix}.$$

На другому етапі алгоритму (зворотний хід) відбувається визначення значень невідомих. З останнього рівняння перетвореної системи може бути обчислене значення змінної x_{n-1}, після цього з передостаннього рівняння стає можливим визначення змінної x_{n-2} тощо.

Прямий хід алгоритму Гауса. На цьому етапі проводиться послідовне виключення невідомих у рівняннях розв'язуваної системи лінійних рівнянь. На ітерації $i, 0 \le i < n-1$, методу проводиться виключення невідомої x_i для всіх рівнянь із номерами k, більшими i (тобто $i < k \le n-1$). Для цього з відповідних рівнянь віднімають i-й рядок, помножений на константу a_{ki}/a_{ii} для того, щоб вислідний коефіцієнт при невідомій x_i у рядках виявився нульовим – усі необхідні обчислення можуть бути визначені за допомогою таких співвідношень:

$$a'_{kj} = a_{kj} - \frac{a_{ki} \cdot a_{ij}}{a_{ii}}, b'_k = b_k - \frac{a_{ki} \cdot b_i}{a_{ii}}, i \le j \le n-1.$$

На рис. 4.1 наведена загальна схема стану даних на i-ій ітерації прямого ходу алгоритму Гауса. Усі коефіцієнти при невідомих, розташовані нижче головної діагоналі та лівіше i-го стовпця, уже є нульовими. Далі відбувається обнулення коефіцієнтів i-го стовпця, розташованих нижче головної діагоналі, шляхом віднімання i-го рядка, помноженого на потрібну ненульову константу. Після проведення $(n-1)$ подібних ітерацій матриця, що визначає систему лінійних рівнянь, стає приведеною до верхнього трикутного вигляду.

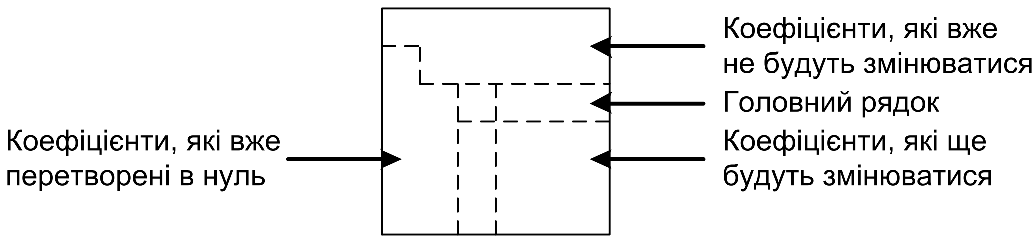

Рис. 4.1. Ітерація прямого ходу алгоритму Гауса

У процесі виконання прямого ходу методу Гауса рядок, який використовують для виключення невідомих, називають головним, а діагональний елемент головного рядка називають головним елементом. Як можна помітити, виконання обчислень є можливим тільки в тому випадку, якщо головний елемент має ненульове значення. Більше того, якщо головний елемент a_{ii} має мале абсолютне значення, то ділення відповідних коефіцієнтів рядків на цей елемент може призвести до накопичення обчислювальних похибок й обчислювальної нестійкості алгоритму.

Можливий спосіб уникнути подібної проблеми може полягати у виконанні низки таких дій. Під час проведення кожної чергової ітерації прямого ходу методу Гауса слід визначити коефіцієнт із максимальним значенням за абсолютною величиною в стовпці, що відповідає невідомій, яка виключається, тобто $\max\limits_{i \le k \le n-1} \left| a_{ki} \right|$, і вибрати головним рядок, у якому цей коефіцієнт розташовується. Зазначену схему вибору елемента з максимальним абсолютним значенням називають методом головних елементів.

Обчислювальна складність прямого ходу алгоритму Гауса з вибором головного рядка має порядок $O\left(n^3\right)$.

Зворотний хід алгоритму Гауса. Після приведення матриці коефіцієнтів до верхнього трикутного вигляду стає можливим визначення значень невідомих. З останнього рівняння перетвореної системи може бути обчислене значення змінної x_{n-1}, після цього з передостаннього рівняння стає можливим визначення змінної x_{n-2} тощо. У загальному вигляді обчислення, здійснювані під час виконання зворотного ходу алгоритму Гауса, можуть бути представлені за допомогою таких співвідношень:

$$x_{n-1} = b_{n-1} / a_{n-1,n-1},$$

$$x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} a_{ij} \cdot x_j \right) \Bigg/ a_{ii},\ n-1 > i \ge 0.$$

Обчислювальна складність зворотного ходу алгоритму Гауса становить $O\left(n^2\right)$.

Визначення підзадач

У разі уважного розгляду методу Гауса можна помітити, що всі обчислення зводяться до однотипних обчислювальних операцій над рядками матриці коефіцієнтів системи лінійних рівнянь. Як результат, в основу паралельної реалізації алгоритму Гауса може бути покладений принцип розпаралелювання за даними. Тоді базовою підзадачею можна вважати всі обчислення, пов'язані з обробленням одного рядка матриці A та відповідного елемента вектора b.

Виділення інформаційних залежностей

Розглянемо загальну схему паралельних обчислень й інформаційні залежності, що виникають при цьому між базовими підзадачами.

Для виконання прямого ходу методу Гауса необхідно здійснити $(n-1)$ ітерацію з виключення невідомих для перетворення матриці коефіцієнтів A до верхнього трикутного вигляду.

Виконання ітерації $i, 0 \le i < n-1$, прямого ходу методу Гауса включає низку послідовних дій. Насамперед, на самому початку ітерації необхідно вибрати головний рядок, який в разі використання методу головних елементів є рядком з найбільшим за абсолютною величиною значенням серед елементів i-го стовпця, що відповідає змінній x_i, яка виключається. Оскільки рядки матриці A розподілені по підзадачах, для пошуку максимального значення підзадачі з номерами $k, i < k \le n-1$, повинні обмінятися своїми елементами при змінній x_i, яка виключається. Після збирання всіх необхідних даних кожній підзадачі стане відомо, яка з підзадач містить головний рядок і яке значення є головним елементом.

Далі для продовження обчислень підзадача, що містить провідний рядок матриці A й відповідний елемент вектора b, повинна розіслати їх усім іншим підзадачам з номерами $k, i < k \le n-1$. Отримавши провідний рядок, підзадачі виконують віднімання рядків, забезпечуючи тим самим виключення відповідної змінної x_i.

Під час виконання зворотного ходу методу Гауса підзадачі виконують необхідні обчислення для знаходження значень змінних. Як тільки яка-небудь підзадача $i, n-1 > i \ge 0$, визначає значення своєї змінної x_i, це значення повинне бути розіслане всім підзадачам з номерами $k, i > k \ge 0$. Потім підзадачі підставляють отримане значення поточної змінної й коригують значення елементів вектора b.

Масштабування та поділ підзадач між процесорами

Виділені базові підзадачі мають однакову обчислювальну трудомісткість і збалансований обсяг передаваних даних. У випадку, коли розмір матриці, що описує систему лінійних рівнянь, виявляється більшим, ніж кількість доступних процесорів (тобто $p < n$), обсяг базових підзадач можна збільшити, об'єднавши в рамках однієї підзадачі кілька рядків матриці. Однак застосування послідовної схеми поділу даних для паралельного розв'язання систем лінійних рівнянь призведе до нерівномірного обчислювального завантаження процесорів. У міру виключення (на прямому ході) або визначення (на зворотному ході) невідомих у методі Гауса для все більшої частини процесорів усі необхідні обчислення будуть завершені й процесори перейдуть у стан простою. Можливе рішення проблеми балансування обчислень може полягати у використанні стрічкової циклічної схеми для розподілу даних між підзадачами збільшеного обсягу. У цьому випадку матриця A ділиться на набори (смуги) рядків, що мають вигляд, наведений на рис. 4.2.

$$A = \left(A_0, A_1, ..., A_{p-1}\right)^T, A_i = \left(a_{i_0}, a_{i_1}, ..., a_{i_{k-1}}\right), i_j = i + j \cdot p, 0 \le j < k, k = m/p.$$

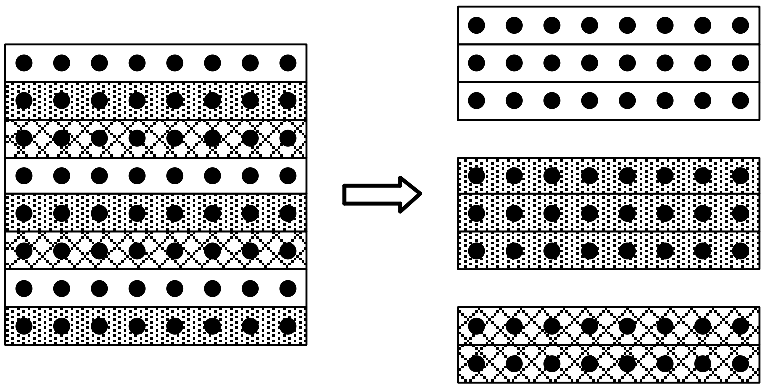

Рис. 4.2. Приклад використання стрічкової циклічної схеми поділу рядків матриці між трьома процесорами

Зіставивши схему поділу даних і порядок виконання обчислень у методі Гауса, можна відзначити, що використання циклічного способу формування смуг дозволяє покращити балансування обчислювального навантаження між підзадачами.

Розподіл підзадач між процесорами повинен враховувати характер виконуваних у методі Гауса комунікаційних операцій. Основним видом інформаційної взаємодії підзадач є операція передачі даних від одного процесора всім процесорам обчислювальної системи. Як результат, для ефективної реалізації необхідних інформаційних взаємодій між базовими підзадачами топологія мережі передачі даних повинна мати структуру гіперкуба або повного графа.

Контрольні запитання

1. У чому полягає постановка задачі розв'язання системи лінійних рівнянь?
2. Опишіть схему програмної реалізації паралельного варіанта методу Гауса.

Індивідуальні завдання

Розробити паралельну реалізацію алгоритму Гауса в середовищі MPI.