Предобусловливание на основе LU-разложения в итерационных методах для решения систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами

С.Ю. Гоголева[1]

[1]Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Предлагается новый подход к предобусловливанию на основе LU – разложения для решения систем линейных алгебраических уравнений итерационными методами, который позволяет находить приемлемое по точности решение с минимальным заполнением разреженных матриц.

1. Введение

Решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) − одна из основных задач вычислительной линейной алгебры. Все методы решения линейных алгебраических систем можно разделить на два класса: прямые и итерационные (приближенные). Каждый метод имеет свои достоинства и недостатки, на каком остановить свой выбор при решении конкретной задачи в основном зависит от структуры матрицы СЛАУ: размера, обусловленности, симметричности, заполненности (т.е. соотношения между числом ненулевых и нулевых элементов), специфики расположения ненулевых элементов в матрице и др. В настоящее время наибольший интерес приобрели итерационные методы, которые позволяют решать СЛАУ с разреженными матрицами больших размерностей [7].

Разреженные матрицы встречаются при решении различных практических задач: структурного анализа, теории электрических сетей и энергосистем распределения энергии, численного решения дифференциальных уравнений, теории графов, а также генетики, социалогии, поведенческих наук и других. В связи с тем, что размерность матриц в большинстве случаев оказывается очень большой, необходимо организовать хранение разреженных объектов (матриц, векторов) таким образом, чтобы в памяти ЭВМ были только ненулевые элементы. Это позволит ускорить время работы алгоритма, а так же сэкономить память [2].

Достаточно интересным случаем являются СЛАУ с несимметричными плохо обусловленными разреженными матрицами больших размерностей. Наиболее эффективными и устойчивыми среди итерационных методов решения таких систем уравнений считаются так называемые проекционные методы, которые связаны с проектированием на подпространства Крылова. Они не требуют нахождения оптимальных итерационных параметров и обязательной априорной информации о спектре исходной матрицы, а так же допускают работу с предобусловливателями разных типов [2, 6].

Предобусловливатели для итерационных методов могут основываться на классических итерационных методах (Якоби, Гаусса-Зейделя и др.) или различных модификациях разложений исходной матрицы (разложение Холецкого, LU - разложение и др.). В данной работе предлагается предобусловливатель, применяемый к СЛАУ при ее решении итерационными методами подпространства Крылова и основанный на LU – разложении матрицы. Он обеспечивает меньшее заполнение матрицы, а так же более высокую скорость сходимости и точность решения по сравнению с другими предобусловливателями.

2. Постановка задачи

Рассмотрим систему алгебраических уравнений

$$Ax = b, \tag{1}$$

где матрица $A \in R^{n\times n}$, $b \in R^n$, $detA \neq 0$.

Данную систему можно решать, как прямыми методами, так и итерационными. Для разреженных СЛАУ с целью уменьшения заполнения рассматривают итерационные методы. Итерационные методы всегда дают приближенное решение, для получения точного решения необходимо бесконечное число итераций, поэтому вводят критерии остановки метода. Скорость сходимости метода определяется количеством приближений, которые построены методом до тех пор, пока не выполнен критерий остановки. По причине накопления вычислительной погрешности метод, который сходится в теории, на практике может разойтись, чтобы этого избежать используется предобусловливание системы – переход к СЛАУ с тем же решением и матрицей, обладающей лучшими качествами, с помощью домножения системы на матрицу специального вида. Среди итерационных методов наиболее устойчивыми, эффективными, а так же допускающими работу с предобусловливателями разных типов являются так называемые проекционные методы, и особенно тот их класс, который связан с проектированием на подпространства Крылова.

Рассмотрим вместо исходной системы (1) новую систему

$$\breve{A}\,\breve{x} = \breve{b} \tag{2}$$

где $\breve{b} = M_1^{-1}b$, $\breve{A} = M_1^{-1}AM_2^{-1}$, $\breve{x} = M_2x$, M_1, M_2 - невырожденные матрицы размерности n.

Процесс перехода от (1) к (2) с целью улучшения характеристик матрицы для ускорения сходимости к решению называется предобусловливанием, матрица M^{-1} матрицей предобуславливателя, а система (2) называется предобусловленной [2, 6]. Рассмотрим левое предобусловливание, которое чаще всего применяется на практике. В случае левого предобусловливания система (1) примет вид

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b, \tag{3}$$

которая в силу невырожденности M имеет то же точное решение $\tilde{x}$. Введем обозначения $\hat{A}$=$M^{-1}A$, $\hat{b}$ =$M^{-1}b$, тогда (3) примет вид:

$$\hat{A}x = \hat{b}. \tag{4}$$

3. Предобусловливатель на основе LU−разложения с частичным выбором ведущего элемента и порогом заполнения.

В данной работе предлагается предобусловливатель, применяемый к СЛАУ (1) при ее решении итерационными методами подпространства Крылова и основанный на LU – разложении матрицы *A*. Построим матрицу предобусловливателя M=LU для перехода от системы (1) к системе (4). Очевидно, что построенная таким образом матрица M удовлетворяет всем требованиям к матрице предобуслоавливателя. Она близка к матрице A; она легко вычислима по формулам LU-разложения [1]; наконец, она легко обратима, так как является произведением двух треугольных матриц. Таким образом, выбор является достаточно хорошим способом предобусловливания. Выбор в качестве матрицы предобусловливателя M=LU для СЛАУ с разреженными матрицами больших размерностей влечет за собой заполнение портрета матриц L и U, т.е. появлению в этих матрицах ненулевых элементов в тех позициях, в которых $a_{ij} = 0$. Тем самым резко возрастает объем памяти, который требуется для хранения матрицы предобуславливателя. Избежать этого возможно, если в качестве предобусловливателя использовать LU-разложение матрицы A без заполнения. В этом случае матрица задается в виде $M = \bar{L}\bar{U}$, где $\bar{L}$ и $\bar{U}$ нижне- и верхнетреугольные матрицы, соответственно. Матрицы $\bar{L}$ и $\bar{U}$ вычисляются аналогично матрицам L и U, при помощи LU-разложения матрицы [1], лишь с тем отличием, что если $a_{ij} = 0$, то полагаем $l_{ij} = 0$ и $u_{ij} = 0$ [2,6]. Обозначим этот предобусловливатель LU(0). Он вполне эффективно справляется с решением некоторых задач, например, если матрица системы с диагональным преобладанием, но довольно грубо аппроксимирует сильно несимметричные матрицы, вследствие чего возрастает относительная погрешность решения.

В данной работе предлагается предобусловливатель, применяемый к СЛАУ (1) при ее решении итерационными методами подпространства Крылова и основанный на LU – разложении матрицы A, который обеспечивает меньшее заполнение портрета матрицы системы, а так же более высокую скорость сходимости и точность решения по сравнению с предобуслоавливателем LU(0).Рассмотрим систему (1), невырожденная матрица A в общем случае может содержать на главной диагонали нулевые элементы, тогда не один из рассмотренных предобусловливателей применить невозможно из-за возникновения деления на ноль. В случае плохо обусловленных матриц отсутствие предобусловливателя может повлечь за собой невозможность нахождения решение системы.

Поэтому предложим способ LU(t) – разложения с выбором ведущего элемента, который решает проблему деления на ноль, что позволяет применять его к невырожденным матрицам A с произвольным портретом. Использование же порога заполнения портрета матрицы [7,8] сокращает объем памяти требуемый для хранения матрицы предобусловливателя. Как правило, частичного выбора ведущего элемента для построения такого предобусловливателя оказывается вполне достаточно.

Поскольку полное разложение приводит к заполнению портрета матрицы, без каких либо ограничений, прибегнем к введению некоторого уровня заполнения. В алгоритм LU-разложения с частичным выбором ведущего элемента [7] введем параметр t, называемый критерием заполнения, и определим его следующим способом:

$$t = \|A\|_2 \varepsilon_{маш}, \quad (5)$$

где $\varepsilon_{маш}$ – машинное эпсилон, а $\|A\|_2$ - евклидова норма матрицы.

Такой способ исключения ненулевых элементов плох в случае не отмасштабированных матриц, в силу большого значения $\|A\|_2$, критерий заполнения, заданный по (5), становится слишком высоким и не может быть применен. Тогда параметр задается как $t = \varepsilon$, где $\varepsilon -$ некоторая заданная точность.

Исследование построенных алгоритмов проводилось на реальных задачах, в качестве тестовых матриц были выбраны матрицы из коллекции Harwell-Boeing [5]. В таблице 1 приведен список рассмотренных матриц вместе с их характеристиками: размерами, числом ненулевых элементов и областью применения.

Таблица 1. Характеристики тестируемых матриц.

HB-матрица	Размер	Количество ненулевых элементов	Область применения
MCCA	180	2659	Астрофизика
MCFE	765	24382	Астрофизика
ARC 130	130	1037	Различная область
FS 183 1	183	998	Химическая кинетика
FS 541 4	541	4285	Различная область
WATT 1	1856	11360	Нефтяная кинетика

Результаты заполнения матриц в результате решения СЛАУ с использованием предобусловливателя на основе LU- разложения с выбором ведущего элемента и параметра представлены в таблице 2.

Таблица 2. Заполнение портрета матриц.

Название матрицы	Заполнение при *LU*–разложении	Заполнение при *LU*(t) – разложении с выбором ведущего элемента
ARC 130	8183	1150
FS 183 1	12904	6128
FS 541 4	111871	39923
MCCA	1603	3735
MCFE	56073	62949
WATT 1	206542	187387

На рисунке 1 мы видим заполнение, которое получилось после решения СЛАУ с одной из матриц [5] FS 183 1.

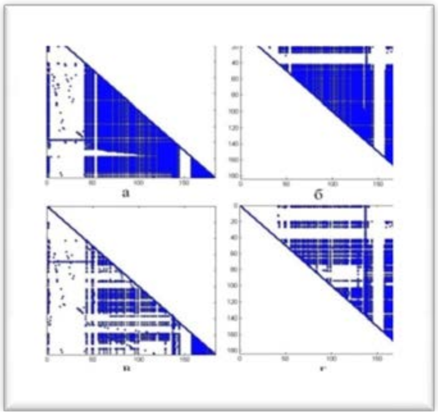

Рисунок 1. Портреты матрицы FS 183 1 после *LU* – разложения (а, б), *LU*(t) – разложения с выбором ведущего элемента и параметром (в, г).

Видим, что комбинирование выбора ведущего элемента и параметра в предобусловливателе на основе LU- разложения позволяет уменьшить заполнение.

Приведем результаты решения СЛАУ итерационными методами для одной из матриц таблицы 1.

Таблица 3. Результаты работы методов для матрицы FS 541 4.

Название метода	Предобусловливатель	Число итераций	Относительная погрешность
Метод квазиминимальных невязок	Отсутствует	1076	0,45e-5
	Якоби	209	0,85e-5
	LU–разложение	2	0,11e-10
	LU(0) –разложение	9	0,11e-5
	LU(t) – разложение с выбором ведущего элемента	2	0,64e-11
Стабилизированный метод бисопряженных градиентов	Отсутствует	863	0,39e-5
	Якоби	120	0,28e-4
	LU–разложение	1	0,19e-10
	LU(0) –разложение	4	0,4e-5
	LU(t) – разложение с выбором ведущего элемента	1	0,35e-10
Квадратичный метод сопряженных градиентов	Отсутствует	962	0,12e-4
	Якоби	132	0,94e-5
	LU–разложение	1	0,75e-11
	LU(0) –разложение	4	0,82e-5

	LU(t) – разложение с выбором ведущего элемента	1	0,1e-10
Метод обобщенных минимальных невязок	Отсутствует	228	0,11e-3
	Якоби	144	0,99e-3
	LU–разложение	1	0,19e-10
	LU(0) –разложение	10	0,32e-6
	LU(t) – разложение с выбором ведущего элеента	2	0,13e-10
Метод бисопряженных градиентов	Отсутствует	1104	0,35e-6
	Якоби	212	0,38e-5
	LU–разложение	2	0,69e-11
	LU(0) –разложение	9	0,11e-5
	LU(t) – разложение с выбором ведущего элемента	2	0,76e-11

В соответствие с таблицами 2 и 3, в сравнении с предобусловливателем, основанном на LU–разложении, предобусловливатель с LU(t) –разложением с выбором ведущего элемента и параметром не уступает практически в точности решения и скорости сходимости, но уменьшает затраты на память в несколько раз. Методы с предобусловливателем на основе LU-разложения превосходят по точности и скорости сходимости методы с предобусловливателем Якоби.

4. Заключение

В работе было проведено исследование предобусловливателей на основе LU−разложения и Якоби, а так же их влияние на эффективность решения систем линейных алгебраических уравнений рассмотренными итерационными методами. Определено, что наибольшая скорость сходимости достигается методом обобщенных минимальных невязок и квадратичным методом сопряженных градиентов, особенно в сочетании с LU–разложением. Решение СЛАУ с наибольшей точностью можно найти методом квазиминимальных невязок и методом бисопряженных градиентов с LU–разложением. На основе предобусловливателя с LU−разложением разработана модификация, позволяющая сократить заполнение матрицы, без существенных потерь точности решения, что подтверждается экспериментально, особенно при использовании его в методе квазиминимальных невязок и методе бисопряженных градиентов. К тому же разработанный предобусловливатель с LU(t)–разложением с выбором ведущего элемента применим к матрицам с произвольным портретом, СЛАУ с которыми в большинстве случаев без использования предобусловливателя решить не возможно.

5. Литература

[1] Голуб, Дж. Матричные вычисления / Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. – М.: Мир, 1999. – 548 с.

[2] Баландин, М.Ю. Методы решения СЛАУ большой размерности / М.Ю. Баландин, Э.П. Шурина. – Новосибирск: НГТУ, 2000. – 70 с.

[3] Деммель, Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения / Дж. Деммель – М.: Мир, 2001. – 430 с.

[4] Саух, С.Е. Неполная столбцово-строная факторизация матриц для итерационного решения больших систем уравнений / С.Е. Саух // Электронное моделирование. – 2010. – Т. 32, № 6. – С. 3-14.

[5] Harwell-BoeingCollection. MatrixMarket, 1998. – [Electronic resource]. URL: http://math.nist.gov/MatrixMarket/data/Harwell-Boeing/ (5.12.17).

[6] Chen, T.-Y. Preconditioning Sparse Matrices for Computing Eigenvalues and Solving Linear Systems of Equations / T.-Y. Chen // University of California at Berkeley, 2011. – 135 p.

[7] Saad, Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems / Y. Saad. – Minneapolis: University of Minnesota MN, 2003. – 567 p.

[8] Saad, Y. ILUT: A dual threshold incomplete ILU factorization / Y. Saad // Numer. Linear Algebra Appl. – 1994. – Vol. 1. – P. 739-748.

Preconditioning based on LU-decomposition in iterative methods for solving systems of linear algebraic equations with sparse matrices

S.Y. Gogoltva[1]

[1]Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. A new approach to preconditioning based on LU - decomposition for solving systems of linear algebraic equations by iterative methods is proposed. The approach makes it possible to effectively to find an acceptable solution with a minimum filling of sparse matrices.

Keywords: preconditioning, LU is the expansion, iterative methods, sparse matrices, filling in, Lead Element Selection.