УДК 519.6

С.В. МОІСЕЄНКО
Херсонський національний технічний університет

ПОРІВНЯННЯ ІТЕРАЦІЙНИХ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ РОЗРІДЖЕНИХ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ

У даній роботі представлений огляд ітераційних методів розв'язання розріджених систем лінійних алгебраїчних рівнянь великої розмірності. Проведений порівняльний аналіз методів розв'язання СЛАР. Продемонстровано, що методу узагальнених мінімальних нев'язок для розріджених матриць притаманна висока обчислювальна ефективність при розв'язанні задач еліптичного типу з погано обумовленою матрицею.

Ключові слова: ітераційні методи, системи лінійних алгебраїчних рівнянь великої розмірності.

S.V. MOISEENKO
Kherson National Technical University

COMPARATIVE OF ITERATIVE METHODS FOR SOLVING SPARSE SYSTEMS OF LINER ALGEBRAIC EQUATIONS

Abstract

In this work, overview of iterative methods for solving sparse systems of linear algebraic equations of high dimensionality was provided. A comparative analysis of methods for solving linear algebraic equation was performed. It is shown that the method of generalized minimal residual (GMRES) for sparse matrices has high computational efficiency for solving problems of elliptic type with an ill-conditioned matrix.

Keywords: iterative methods, systems of linear algebraic equations equations of high dimensionality.

Постановка проблеми

Чисельне моделювання реальних фізичних процесів ґрунтується на застосуванні рівнянь математичної фізики різного типу. Дискретні аналоги вихідних диференціальних рівнянь приводять до необхідності розв'язання розріджених систем алгебраїчних лінійних рівнянь (СЛАР) [1-3]. Основна частина комп'ютерних ресурсів витрачається на розв'язання системи лінійних рівнянь, тому однією з ключових проблем математичного моделювання є вибір оптимального методу розв'язання СЛАР.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Усі використовувані на практиці методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь можна розділити на дві великі групи: прямі та ітераційні методи [3, 4]. Під прямим методом розв'язання розуміється метод, що дозволяє теоретично отримати точне значення усіх невідомих в результаті кінцевого числа арифметичних операцій (метод Крамера). Ітераційні методи дозволяють знаходити рішення тільки у вигляді межі послідовності векторів, побудова якого відбувається однаковим процесом, називаючись процесом ітерацій, або послідовних наближень [4, 5].

Основні аргументи на користь ітераційних методів засновані на економії комп'ютерної пам'яті і процесорного часу. Також перевагою ітераційних методів є зручне застосування у сучасній обчислювальній техніці. При розв'язанні розріджених систем лінійних рівнянь великої розмірності прямі методи стають неефективними у силу накопичення помилок округлення і великого числа математичних операцій. Ітераційні методи дозволяють отримати рішення системи з наперед визначеною точністю. Явним плюсом є значна перевага перед прямими методами у швидкості збіжності, а також зручна реалізація на практиці.

Зазвичай, ітераційні методи застосовуються до розріджених систем лінійних алгебраїчних рівнянь, які виникають при скінченно-елементній, скінченно-різницевій або скінченно-об'ємній апроксимації диференціальних рівнянь (систем рівнянь) в частинних похідних. Ітераційні методи часто використовуються в комбінації з операторами предобумовленності (preconditioning), які дозволяють підвищити швидкість збіжності даного методу. Також ітераційні методи успішно застосовуються при розв'язанні деяких великих щільних СЛАР.

Найбільш ефективними і стійкими серед ітераційних методів розв'язання таких систем рівнянь є так звані проекційні методи, і особливо метод, який пов'язаний з підпростором Крилова. З усіх ітераційних методів вони відрізняються найбільшою стійкістю. У роботах [4, 5] описані ітераційні методи та приділено особливу увагу різним формам предобумовленності. У роботі [3] наведено огляд методів розв'язання СЛАР заснованих на підпросторі Крилова. Опис чисельних алгоритмів ітераційних методів розв'язання СЛАР розглянуто в [3].

Формулювання мети дослідження

Слід зазначити, що в даний час відсутні універсальні методи, що однаково добре працюють для різних класів задач. Як правило, завдання полягає в тому, щоб знайти найбільш ефективний метод для конкретної проблеми. У цій роботі проведено порівняльний аналіз методів розв'язання СЛАР для рівнянь математичної фізики еліптичного типу.

Викладення основного матеріалу дослідження

Далі розглянемо методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

Ітераційні методи бувають двох видів: стаціонарні та нестаціонарні.

Стаціонарний ітераційний метод – це метод, який може бути представлений у наступній простій формі

$$x^{k+1} = \mathbf{A}x^k + c \ ,$$

де A і c не залежать від номера ітерації. Якщо така залежність існує, то метод нестаціонарний.

Стаціонарні ітераційні методи існують досить давно, вони прості для розуміння і реалізації, але, як правило, не настільки ефективні у порівнянні з нестаціонарними. Нестаціонарні методи порівняно нові, і вони можуть бути дуже ефективними з точки зору обчислювальних витрат.

Швидкість, з якою ітераційний метод сходиться, багато в чому залежить від спектрального радіусу матриці. Таким чином, ітераційні методи, зазвичай, включають другу матрицю, яка перетворює дану матрицю до матриці з меншим спектральним радіусом. Матриця перетворення називається матрицею предобумовленності. Гарне предобумовлення покращує збіжність ітераційного методу. Без предобумовлення ітераційний метод може навіть не зійтися.

На сьогоднішній день розроблено велику кількість ітераційних методів. Зупинимося на тих, які ілюструють історичний розвиток ітераційних методів для вирішення великих розріджених систем лінійних рівнянь.

Стаціонарні методи:

– Метод Якобі базується на рішенні для кожної змінної локально по інших змінних, одна ітерація методу відповідає розв'язанню для кожної змінної один раз. Метод простий для розуміння і реалізації, але сходиться повільно.

– Метод Гаусса-Зейделя можна розглядати як модифікацію методу Якобі. Основна ідея модифікації полягає у тому, що нові значення використовуються тут відразу ж у міру отримання, у той час як у методі Якобі вони не використовуються до наступної ітерації.

– Метод послідовної верхньої релаксації (Successive Overrelaxation – SOR) може бути отриманий з методу Гауса-Зейделя шляхом введення екстраполяційного параметра ω. При оптимальному виборі ω метод може сходитися на порядок швидше, ніж метод Гаусса-Зейделя.

– Метод симетричною послідовної верхньої релаксації (Symmetric Successive Over-Relaxation – SSOR) не має переваг перед SOR як незалежний ітераційний метод, однак використовується у якості предобумовленності для нестаціонарних методів.

Нестаціонарні методи:

– Метод сполучених градієнтів (Conjugate Gradient – CG) – метод знаходження локального мінімуму функції на основі інформації про її значення та її градієнта.

– Метод мінімальних нев'язок (MINimum RESidual – MINRES). Цей метод є обчислювальною альтернативою для методу сполучених градієнтів для матриці, коефіцієнти якої є симетричними і позитивно невизначеними.

– Метод узагальнених мінімальних нев'язок (Generalized Minimal Residual – GMRES). Даний метод обчислює послідовність ортогональних векторів (як MINRES) і вирішує їх методом найменших квадратів. Проте, на відміну від MINRES (і CG), вимагає зберігання усієї послідовності, так що необхідний великий обсяг пам'яті. З цієї причини використовуються пізні версії цього методу, у яких обчислення і витрати на зберігання обмежуються вказівкою на фіксовану кількість векторів, які будуть створені. Цей метод корисний для довільних несиметричних матриць.

– Біспряжені градієнти (BiConjugate Gradient – BiCG). Метод біспряжених градієнтів створює дві послідовності векторів сполучених градієнтів, один з яких базується на системі з оригінальними коефіцієнтами матриці A, а інший – на A^T. Замість ортогоналізації кожної послідовності вони є взаємно ортогональними або "біортогональними". Цей метод, як і CG, використовує обмежену кількість пам'яті. Це корисно, коли матриця симетрична, однак збіжність може бути нерегулярною. BiCG вимагає множення на коефіцієнти матриці та її транспонування на кожній ітерації.

Метод ітерацій Чебишева рекурсивно визначає многочлени з коефіцієнтами, обраними для зведення до мінімуму норми залишку в сенсі мінімуму-максимуму. Матриці коефіцієнтів повинні бути позитивно визначеними, також потрібне знання екстремальних власних значень. Перевага у тому, що він не вимагає внутрішніх творів.

Порівняльна характеристика ітераційних методів

Ефективне розв'язання СЛАР значною мірою залежить від вибору ітераційного методу. Нижче розглянемо переваги і недоліки ітераційних методів.

1. Метод Якобі
- Вкрай простий у використанні, але якщо матриця не є діагонально домінуючою, цей метод найкраще розглядати як введення в ітераційні методи або у якості предобумовленності для нестаціонарних методів.
- Простий у розпаралелюванні.

2. Метод Гаусса-Зейделя
- Збіжність швидше, ніж у методу Якобі, але в цілому не може конкурувати з нестаціонарними методами.
- Відноситься до матриць з діагональним переважанням або симетричних позитивно певних матриць.
- Властивості розпаралелювання залежать від структури матриці коефіцієнтів. Різні порядки з невідомими мають різні ступені паралелізму.
- Це окремий випадок методу SOR, отриманий шляхом вибору $\omega = 1$.

3. Метод послідовної верхньої релаксації (SOR)
- Прискорення збіжності Гаусса-Зейделя ($\omega > 1$, верхня релаксація) може призвести до збіжності, коли метод Гаусса-Зейделя не сходиться ($0 < \omega < 1$, нижня релаксація).
- Швидкість збіжності залежить головним чином від ω; оптимальне значення ω може бути оцінено по спектральному радіусу матриці Якобі.
- Властивості розпаралелювання залежать від структури матриці коефіцієнтів. Різні порядки невідомих мають різні ступені паралелізму.

4. Метод сполучених градієнтів (CG)
- Відноситься до симетричної позитивно певній системі.
- Швидкість збіжності залежить від ряду умов.
- Властивості розпаралелювання багато в чому залежать від матриці коефіцієнтів і від структури попередньої обробки.

5. Метод узагальнених мінімальних нев'язок (GMRES)
- Застосовується до несиметричним матриць.
- GMRES призводить до меншої нев'язки для фіксованого числа ітерацій, але ці кроки стають все більш витратними.
- Для того, щоб обмежити збільшення обчислювальних витрат і кількість кроків на одну ітерацію, необхідний перезапуск GMRES.
- GMRES вимагає тільки матрично-векторні твори з матрицею коефіцієнтів.
- Число внутрішніх творів зростає лінійно разом з числом ітерацій до точки перезапуску. У реалізації, заснованої на простому процесі Грама-Шмідта, внутрішні твори незалежні, так що разом вони означають лише одну точку синхронізації. Більш стабільна реалізація базується на модифікованій ортогоналізації Грама-Шмідта і має по одній точці синхронізації на кожний внутрішній твір.

6. Метод біспряжених градієнтів (BiCG)
- Застосовується до несиметричних матриць.
- Вимагає матрично-векторного добутку коефіцієнтів матриці та її транспоновання.
- Властивості розпаралелювання аналогічні властивостям CG.

7. Метод ітерацій Чебишева
- Застосовується до несиметричних матриць.
- Обчислювальна структура аналогічна CG, але в ній немає точок синхронізації.
- Адаптивний метод Чебишева може бути використаний у поєднанні з такими методами, як CG та GMRES.

Вибір "кращого" методу для даного класу задач у значній мірі є питанням спроб і помилок. Хоча з усього різноманіття ітераційних методів найбільш працездатними є метод сполучених градієнтів (CG), метод узагальнених мінімальних нев'язок (GMRES) і метод біспряжених градієнтів (BiCG).

Результати та обговорення

Порівняння нестаціонарних ітераційних методів розв'язання розріджених систем лінійних алгебраїчних рівнянь великої розмірності проведемо на завданні про розподіл електричного потенціалу в заданій області. Рівняння електричного поля являє собою рівняння Лапласа $\nabla\left(\varepsilon_r \nabla \varphi\right) = 0$. У якості початкових умов для рівняння Лапласа задавалося нульове розподілення електричного потенціалу в області. Дане рівняння вирішується шляхом використання прикладеної напруги до електродів як

граничної умови, а також відповідні значення відносної діелектричної проникності для повітря і діелектрика. До відкритого електроду прикладається напруга $\varphi = 30$ кВ, а до ізольованого – нульовий потенціал. На зовнішніх кордонах ставиться умова Неймана. Геометрія розрахункової області наведена на рис. 1.

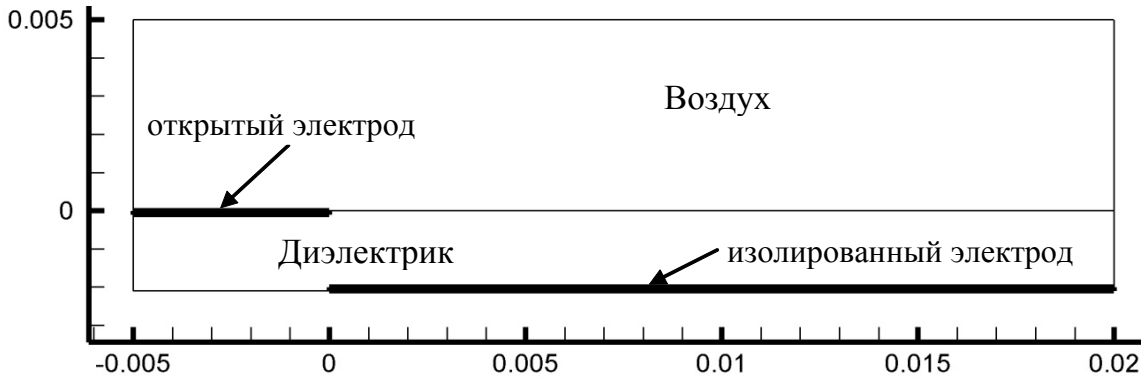

Рис. 1. Геометрія розрахункової області

Діелектрик являє собою керамічний матеріал Macor з відносною діелектричною проникністю $\varepsilon_r = 6$ і товщиною $d = 2{,}1$ мм. Відносна діелектрична проникність повітря $\varepsilon_r = 1{,}0006$. Електроди являють собою смужки міді. Довжина відкритого електрода становить 5 мм, а ізольованого – 25 мм. Початок координат збігається з правим краєм відкритого електрода.

Багатоблокова структурована сітка, що описує геометрію розрахункової області, складається з 5 блоків, із загальною кількістю вузлів 17275 (рис. 2). Мінімальний крок сітки поблизу правого краю відкритого електрода $1 \cdot 10^{-5}$м.

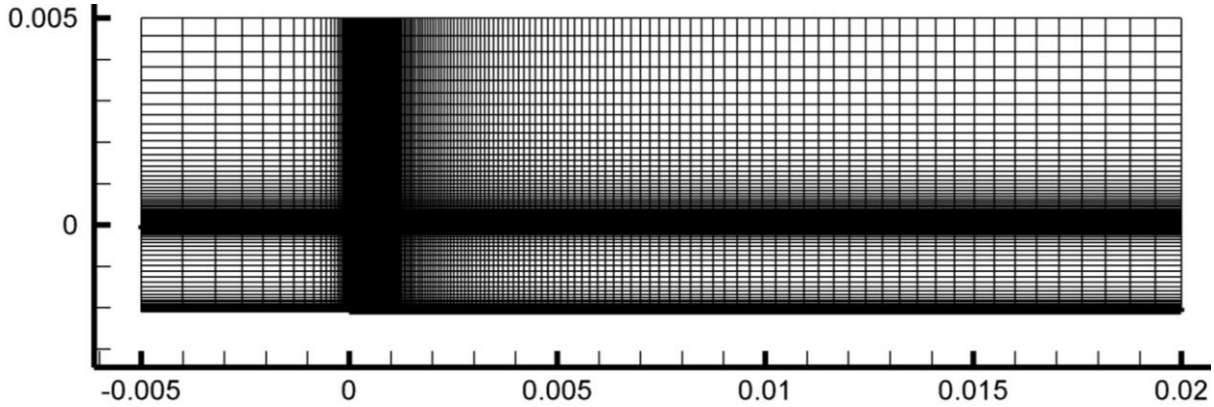

Рис. 2. Багатоблокова структурована сітка

Після дискретизації вихідного рівняння формується розріджена матриця із загальним числом ненульових елементів 94663, включаючи діагональні.

Рівняння Лапласа відноситься до еліптичного типу диференціальних рівнянь, оскільки воно містить змінні коефіцієнти (при других похідних), то до нього не можуть бути застосовані спеціальні методи вирішення типу швидкого перетворення Фур'є. Тому виникає питання про те, який Солвер краще використовувати для отриманої системи лінійних алгебраїчних рівнянь.

Апроксимація рівняння Лапласа призводить до формування симетричною позитивно певної матриці з великим спектральним радіусом. Тобто матриця є погано обумовленою.

Для порівняння виберемо найбільш популярні нелінійні методи вирішення СЛАР: метод сполучених градієнтів (CG), метод узагальнених мінімальних нев'язок (GMRES) і метод біспряжених градієнтів (BiCG). У якості критерію предобумовленості використовується ILU (0) розкладання. Лінійні методи не розглядаються в силу їх від початку поганої збіжності рішення для даного класу рівнянь.

Отримано розподіл електричного потенціалу в галузі (рис. 3). Для наочності результати віднесені до максимального значення напруги $\varphi = 30$ кВ.

Критерієм збіжності виступає норма нев'язки. Система лінійних алгебраїчних рівнянь вважається вирішеною, якщо поточна норма нев'язки менше початкової на сім порядків $\|R_i\|/\|R_0\| < 10^{-7}$.

Зміна норми нев'язки від числа ітерацій для методів CG, GMRES і BiCG наведено на рис. 4. Виходячи з отриманих результатів, видно, що метод сполучених градієнтів не приводить до збіжності. Метод біспряжених градієнтів хоча і призводить до вирішення, проте швидкість збіжності викликає деяку невпевненість у надійність даного методу. І тільки метод узагальнених мінімальних нев'язок показав хорошу і стійку збіжність при вирішенні СЛАР. Тому даний Солвер рекомендується використовувати при розв'язанні систем лінійних алгебраїчних рівнянь з довільною матрицею А.

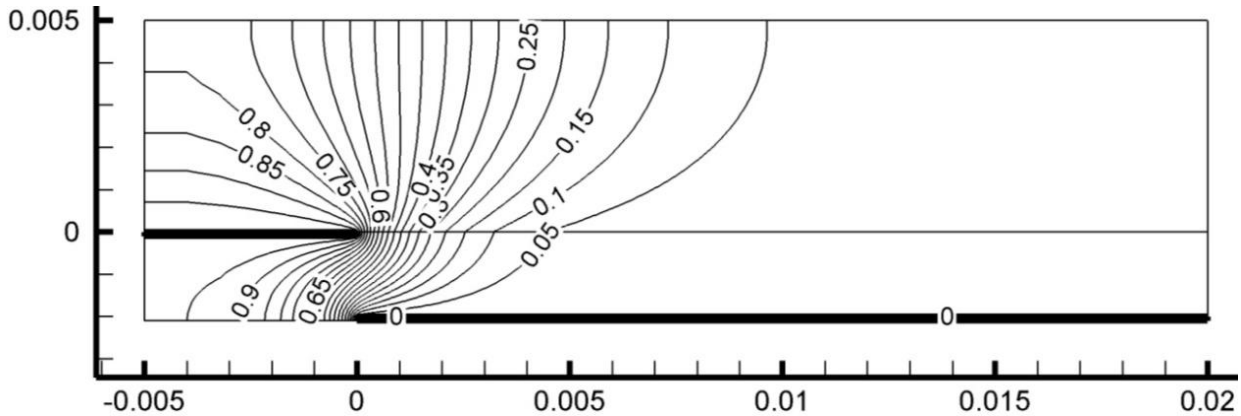

Рис. 3. Розподіл електричного потенціалу потенциала в області віднесеного до максимального значення

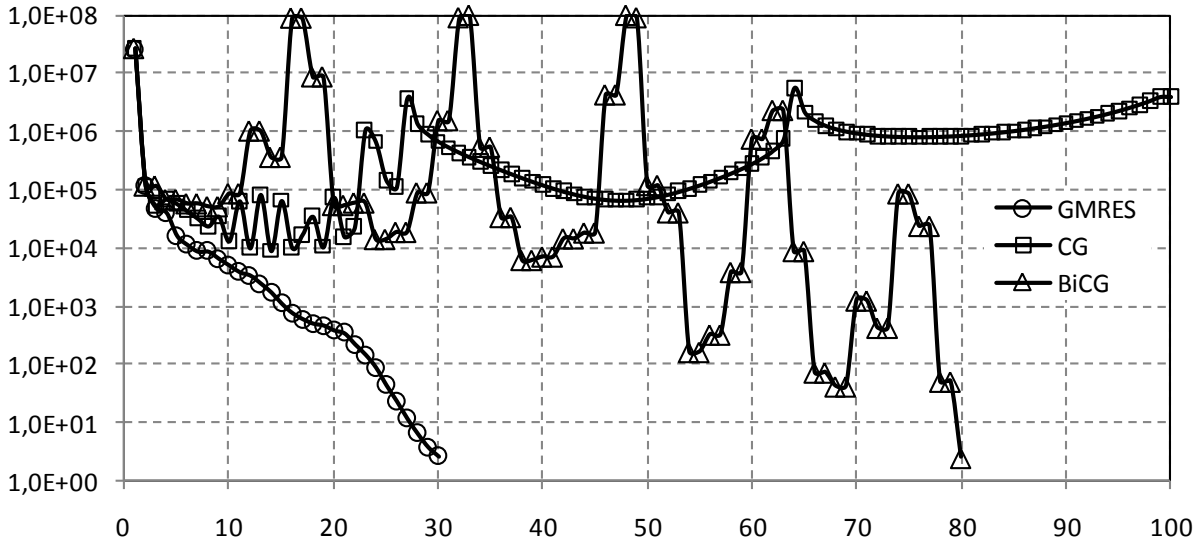

Рис. 4. Зміна норми нев'язки від кількості ітерацій

Висновки

1. Проведено огляд ітераційних методів розв'язання розріджених систем лінійних алгебраїчних рівнянь великої розмірності.

2. На основі переваг і недоліків існуючих методів визначено коло найбільш ефективних способів вирішення систем лінійних алгебраїчних рівнянь з несиметричною позитивно певною матрицею.

3. Встановлено, що метод узагальнених мінімальних нев'язок (GMRES) для розріджених матриць має високу обчислювальну ефективність при вирішенні завдань еліптичного типу з погано обумовленою матрицею.

Список використаної літератури

1. Моисеенко С.В. Расчет априорных вероятностей для решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона методом Монте-Карло [Текст] / С.В. Моисеенко, Ю.И. Николаенко, П.М. Зуб // Вестник Херс. нац. техн. ун-та. – Херсон: ХНТУ, 2010. – Вып. №3 (39). – С. 345 – 349.
2. Редчиц Д.А. Управление вихревой дорожкой Кармана с помощью плазменных актуаторов [Текст] / Д.А. Редчиц, О.Б. Полевой, С.В. Моисеенко // Вестник Днепропетровского ун-та. Механика. – Днепропетровск: ДНУ, 2013. – Т.21, № 5, Вып. 17, Т. 1. – С. 63-80.
3. Van der Vorst, H.A. Iterative Methods for Large Linear Systems [Text] / H.A. van der Vorst; Utrecht University. – Utrecht, The Netherlands, 2002 – 195 p.
4. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems [Text] / Y. Saad; Society for Industrial and Applied Mathematics. – Boston, USA, 528– 195 p.
5. Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods [Text] / M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. Van der Vorst; Society for Industrial and Applied Mathematics. – Philadelphia, USA, 1994. – 195 p.