ПРИКЛАДНА МАТЕМАТИКА

УДК 512.64

Мартинюк П. М., доцент, к.ф.-м.н., Гошко О. В., магістрант
(Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ ЗАСТОСУВАННЯ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ ВЕЛИКИХ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРИЧНИХ РІВНЯНЬ

Наведені результати експериментально-теоретичних досліджень різних методів розв'язання великих систем лінійних алгебричних рівнянь згенерованих за допомогою радіальних базисних функцій та алгоритмів швидкого множення великих матриць.

Ключові слова: система лінійних алгебричних рівнянь, радіальні базисні функції, метод Гауса, метод Якобі, метод Гауса-Зейделя, метод верхньої релаксації, метод симетричної верхньої релаксації, метод Крейга, метод найменших квадратів, алгоритм Штрасена, алгоритм Винограда – Штрасена.

Відшукання розв'язків великих систем лінійних алгебричних рівнянь (СЛАР) [3, 8] – одна із підзадач, яка виникає в процесі розв'язання крайових задач математичної фізики чисельними методами. Із розвитком ЕОМ термін «велика» теж еволюціонує. На нашу думку, на даний час під «великою» можна розуміти СЛАР, яка містить 1000 і більше невідомих.

Кожний чисельний метод математичної фізики приводить до розв'язання СЛАР з матрицями певної структури. Зокрема, метод скінченних елементів (МСЕ) характеризується розрідженими матрицями. Тому для розв'язання таких СЛАР розроблені спеціальні методи [10, 14, 17-19]. Метод скінченних різниць призводить до СЛАР стрічкового виду. Для їх розв'язання, як правило, використовують методи прогонки [13].

Метод радіальних базисних функцій (РБФ) як один із безсіткових методів призводить до СЛАР із повністю заповненими матрицями [6]. Крім того, модифікації даного методу призводять до необхідності розв'язання перевизначених СЛАР [21, 22]. **Ціллю даної статті** є порівняння ефективності роботи різних методів розв'язання саме таких СЛАР.

До початку XIX ст. вчені не мали певних правил для розв'язання системи рівнянь, в якій число невідомих менше ніж число рівнянь. Лежандру (1805-06) і Гаусу (1794-95) належить перше застосування до розв'язання перевизначеної системи лінійних алгебричних рівнянь теорії ймовірностей. Ідея ґрунтувалась на основі багаторазових вимірювань. Цей спосіб поширений і вдосконалений подальшими дослідженнями Лапласа, Енке, Бесселя, Ганзена та ін. і отримав назву методу найменших квадратів.

Не вникаючи в теоретичні основи вказаного методу відмітимо, що основною ідеєю методу найменших квадратів для СЛАР є знаходження матриці $A^T A$, яка буде квадратною. Це дозволяє застосовувати для розв'язання перевизначених СЛАР методи, що розроблені для СЛАР із квадратними матрицями. Тут "T" означає транспоновану матрицю.

Складність обчислення добутку матриць за визначенням становить $O(n^3)$ де n – розмірність матриці. Проте існують більш ефективні алгоритми, що застосовуються для великих матриць [7, 9]. Перший **алгоритм швидкого множення матриць** був розроблений В. Штрасеном [16] в 1969 році. В основі алгоритму лежить рекурсивне розбиття матриць на блоки. На кожному етапі рекурсії виконується сім множень замість восьми. В результаті складність цього алгоритму складає $O(n^{\log_2 7}) = O(n^{2,81})$. Недоліком даного методу є велика складність програмування в порівнянні зі стандартним алгоритмом, чисельна нестійкість і великий обсяг використовуваної пам'яті. Розроблено велику кількість алгоритмів на основі методу Штрасена, які покращують його чисельну стійкість і зменшують обсяг використовуваної пам'яті.

Алгоритм Винограда-Штрасена – це модифікація алгоритму Штрасена, для якої потрібно 7 множень і 15 додавань (замість 18 для звичайного алгоритму Штрасена). Методи швидкого множення матриць є рекурентними. Вхідна матриця розділяється на 4 блочних матриці, цей процес продовжується до тих пір допоки блочна матриця не досягне розміру $N_{\min} \times N_{\min}$. Проведено дослідження оптимального значення $N_{\min}$. Як видно з рис. 1, оптимальним значенням є $N_{\min} = 64$. На всіх рисунках: вісь абсциса – розмірність матриці, ордината – затрачений час в секундах. Всі чисельні експерименти здійснювались на ПК з наступними параметрами:

ЦП: DualCore AMD Athlon 7750 Dual-CoreProcessor, 2700 MHz (13.5 x 200);

ОП: DDR2-800 DDR2 SDRAM (6-6-6-18 @ 400 МГц).

Всі процедури методів виконувались в окремому процесі, що не залежить від графічної оболонки.

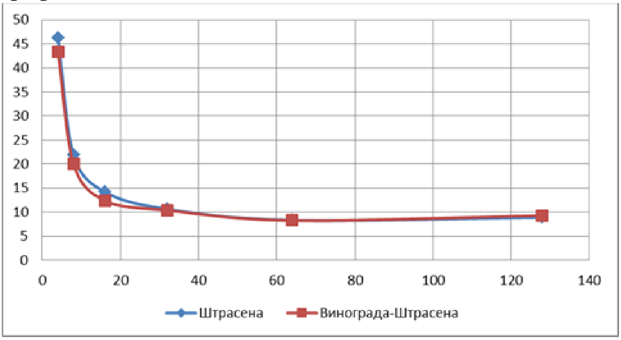

Рис. 1. Залежність часу виконання від $N_{\min}$

На рис. 2 відображено затрачений час на обчислення $A^T A$. Як висновок, – при переході розмірності матриці за 1500 ефективнішим є застосування множення згідно алгоритму Штрасена або Винограда – Штрасена.

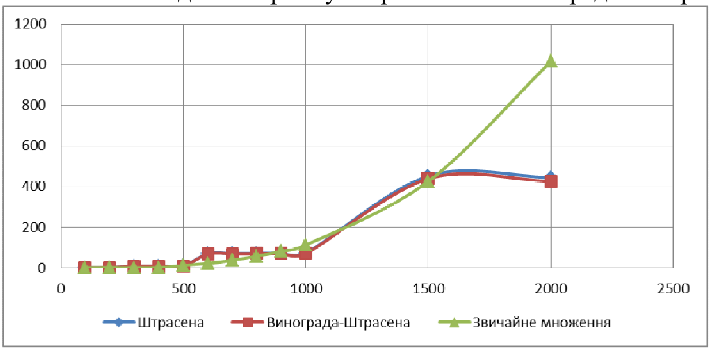

Рис. 2. Залежність часу відшукання $A^T A$ від розмірності матриці

Ітераційні методи розв'язання СЛАР набагато економніші як по машинному часу розв’язування, так і по використанню оперативної пам'яті. Однак, основне питання ітераційного методу – його збіжність. Тому на даний час універсальних ітераційних методів не створено. При появі нових задач вимагається і модифікація ітераційних методів.

Ітераційним методам розв'язання СЛАР присвячена величезна кількість досліджень, які знайшли своє відображення, наприклад, в роботах [12, 19, 20]. На зміну широко поширеним в 50-70-і роки минулого століття методам Якобі, Гауса – Зейделя, різних варіантів методу послідовної верхньої релаксації та їх блоковим модифікаціям, а також методам змінних напрямків і дробових кроків прийшли ітераційні градієнтні методи [9, 19].

Найбільш ефективними і стійкими серед ітераційних методів розв'язку СЛАР є так звані проекційні методи, особливо клас, який пов'язаний з проектуванням на підпростір Крилова.

Прямим методом, який може бути застосованим для розв'язку великої СЛАР є метод Гауса [4, 5]. Суть методу: елементарними перетвореннями над рядками матриці вона приводиться до трикутного вигляду з головної діагоналлю, що складається з одиничних елементів (прямий хід методу Гауса); отримана система з трикутною матрицею розв'язується в явному вигляді (зворотний хід методу Гауса). Даний метод дуже часто використовують в прикладних задачах, проте оцінка кількості арифметичних операцій показує, що він дуже неефективний. Зокрема, метод Гауса вимагає $n^3/3+O(n^2)+O(n^2)=n^3/3+O(n^2)\ (n\to\infty)$ мультиплікативних операцій і стільки ж адитивних операцій. Отже, всього: $(2/3)n^3+O(n^2)\ (n\to\infty)$ арифметичних операцій (рис. 3).

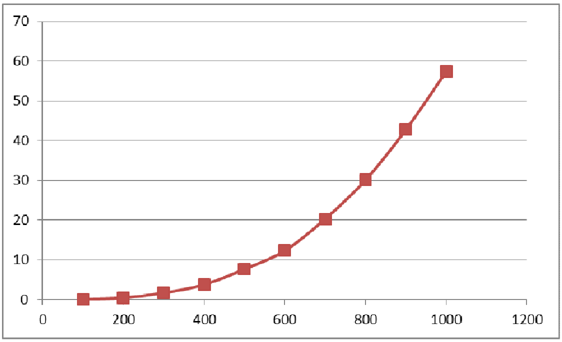

Рис. 3. Залежність часу виконання від розмірності СЛАР методом Гауса

Найпростішою ітераційною схемою, можливо, є ітераційний метод Якобі

$$x_i^{(k+1)}=\left(b_1-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(k)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^{(k)}\right)/\,a_{ii}. \qquad (1)$$

Однак, як показали чисельні експерименти, метод Якобі є повільно збіжним. Тому раціональніше використовувати метод Гауса – Зейделя, також відомий як метод Лібмана – ітераційний метод для розв'язування системи лінійних рівнянь. Він є модифікацією методу Якобі і наступний крок визначається згідно схеми

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_1 - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii}. \qquad (2)$$

Метод Гауса – Зейделя дуже привабливий в силу своєї простоти при програмній реалізації. Збіжність гарантується тільки в тому випадку, коли матриця є або з діагональною перевагою, або є симетричною і додатньо визначеною. Про це говорить наступна теорема.

Теорема [9, ст. 553]. Якщо матриця $A \in R^{n \times n}$ симетрична і додатньо визначена, то ітераційний метод Гауса – Зейделя (2) збігається при довільному векторі $x^{(0)}$.

На рис. 4 наведено результати чисельних експериментів щодо залежності часу розв’язання СЛАР методом Гауса – Зейделя від розмірності. Критерій зупинки (досягнення точності) даного методу вибирався наступним:

$$\left\| A x^{(k)} - b \right\| \le \varepsilon. \qquad (3)$$

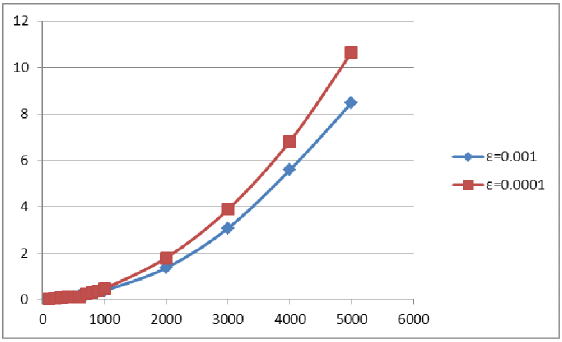

Рис. 4. Залежність часу виконання від розмірності СЛАР методом Гауса – Зейделя

На жаль, якщо спектральний радіус близький до одиниці, то метод (2) може виявитися повільно збіжним. Розглянемо наступну модифікацію ітераційного кроку Гауса – Зейделя:

$$x_i^{(k+1)} = \omega\left(b_1 - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right) / a_{ii} + (1-\omega)x_i^{(k)}. \quad (4)$$

Даний метод отримав назву послідовної верхньої релаксації (SOL – Successive over relaxation). На рис. 5 наведено результати застосування SOL. Також на рис. 6 наведено залежність часу розв'язання від розмірності СЛАР ітераційним методом симетричної послідовної верхньої релаксації (SSOR). Недоліком вказаних методів є вибір параметра ω. Для невеликого числа специфічних задач, значення релаксаційного параметра ω є відомим. У більш складних задачах для визначення відповідного параметра може виникнути необхідність у виконанні дуже важкого аналізу власних значень.

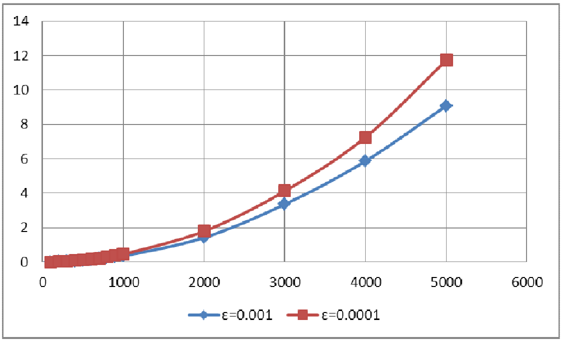

Рис. 5. Залежність часу виконання відносно розмірності СЛАР методом SOL

Існує багато задач, що призводять до погано обумовлених СЛАР [1]. Зокрема, задача розкладання функції по не ортогональному базису, яка часто зустрічається в теорії апроксимації [11]. Так само, до таких СЛАР призводить застосування методу РБФ в крайових задачах математичної фізики [6]. Матриці СЛАР таких задач можуть бути настільки погано обумовленими, що спроби розв'язати їх прямими методами (наприклад, методами Гауса, квадратного кореня) призводять до швидкої втрати точності вже при достатньо невеликих (~10) порядках вихідної матриці. На практиці ж виникають системи порядків 100-1000 і більше.

Погано обумовлена матриця – це загальне поняття, що використовується при описі прямокутної матриці, яка не підходить для проведення якогось виду аналізу. Як правило, в якості критерію поганої обумовленості використовують число обумовленості матриці.

Розглянемо один із спеціальних методів для розв'язання вказаних

СЛАР [2, 15]. Зокрема, модифікований метод Крейга полягає в здійсненні наступних ітераційних кроків:

$$x_0 = 0,\ r_0 = Ax_0 - b,\ \Delta_0 = 0,$$

$$\alpha_0 = \frac{(r_0, r_0)}{(\Delta_0, A\Delta_0)};$$

для k =1,2,…

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_{k-1}\Delta_{k-1},\ n_k = \begin{cases} Ax_k - b \\ n_{k-1} - \alpha_k A\Delta_{k-1} \end{cases},$$

$$\beta_k = \frac{(r_k, r_k)}{(n_{k-1}, n_{k-1})},\ \Delta_k = n_k + \beta_k\Delta_{k-1},\ \alpha_k = \frac{(r_k, r_k)}{(\Delta_k, A\Delta_k)}.$$

Метод Крейга є найбільш універсальним методом типу спряжених напрямів, придатним для розв’язання систем рівнянь з несамоспряженими і навіть прямокутними матрицями (див. рис. 7).

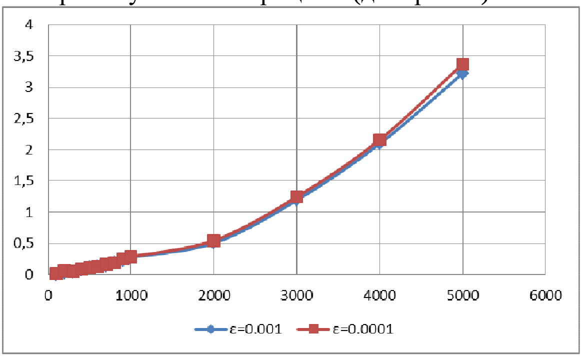

Рис. 6. Залежність часу виконання відносно розмірності СЛАР методом SSOL

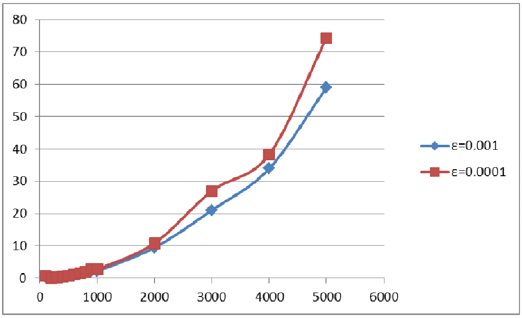

Рис. 7. Залежність часу виконання від розмірності СЛАР методом Крейга

Як видно з рис. 7, ітераційний метод Крейга дає хороші результати. Час розв'язання методом Гауса при n =1000 складає близько хвилини. Тоді, як методом Крейга за цей час можна розв'язати СЛАР з n =5000.

Отже, **як висновок**, відзначимо наступне. З ітераційних методів розв'язання СЛАР найбільш «оптимальним» виявився модифікований метод Крейга. В поняття «оптимальності» входить простота програмної реалізації, вимоги щодо збіжності ітерацій, вимоги до структури та властивостей матриці СЛАР, часові характеристики виконання.

1. Абрамов А. А. Об одном методе решения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений / А. А. Абрамов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1991. – Т. 31, № 4. – С. 483-491. **2.** Абрамов А. А. О применении метода Крейга к решению линейных уравнений с неточно заданными исходными данными / А. А. Абрамов, В. И. Ульянова, Л. Ф. Юхно // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2002. – Т. 42, № 12. – С. 1763-1770. **3.** Баландин М. Ю. Методы решения СЛАУ большой размерности / М. Ю. Баландин., Э. П. Шурина. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2000. – 70 с. **4.** Бахвалов Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. – М. : БИНОМ, 2004. – 636 с. **5.** Богачев К. Ю. Практикум на ЭВМ. Методы решения линейных ситстем и нахождения собственых значений / К. Ю. Богачев. – М. : Изд-во МГУ им. М. В. Ломоносова, 1998. – 137 с. **6.** Власюк А. П. Чисельне розв'язування задач консолідації та фільтраційного руйнування ґрунтів в умовах тепло-масопереносу методом радіальних базисних функцій / А. П. Власюк, П. М. Мартинюк. – Рівне : НУВГП, 2010. – 277 с. **7.** Воеводин В. В. Матрицы и вычисления / В. В. Воеводин, Ю. А. Кузнецов. – М. : Наука, 1984. – 450 с. **8.** Годунов С. К. Решение систем линейных уравнений / С. К. Годунов. – Новосибирск : Наука, 1980. – 250 с. **9.** Голуб Дж. Матричные вычисления / Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. – М. : Мир, 1999. – 548 с. **10.** Джорж А. Численное решение больших разреженных систем уравнений / А. Джорж, Д. Лю. – М. : Мир, 1984. – 333 с. **11.** Калиткин Н. Н. Об аппроксимации неортогональными системами / Н. Н. Калиткин, Л. В. Кузьмина

// Матем. моделирование. – 2004. – Т. 16, № 3. – С.95-108. **12.** Павлов А. С. О решении плохо обусловленных линейных систем итерационными методами / А. С. Павлов, Л. Ф. Юхно // Матем. моделирование. – 2004. – Т. 16, № 7. – С. 13-20. **13.** Самарский А. А. Методы решения сеточных уравнений / А. А. Самарский, Е. С. Николаев. – М. : Наука, 1978. – 592 с. **14.** D. Braess. Finite Elements: Theory, Fast Solvers, and Applications in Solid Mechanics / Braess D. – Cambridge University Press, 2007. – 361 p. **15.** Craig E. The N-step iteration procedures / E. Craig // J. Math. and Phys. – 1955. – V. 34, № 1. – P. 64-73. **16.** Strassen V. Gaussian Elimination is not Optimal / V. Strassen // Numer. Math. – 1969. – 13. – Pp. 354-356. **17.** Elman. H. C. Finite Elements and Fast Iterative Solvers: with Applications in Incompressible Fluid Dynamics. / Elman H. C., Silvester D. J., Wathen A. J. – Oxford: Oxford University Press, 2005. – 416 p. **18.** Gunzburger M. D. Finite element methods for viscous incompressible flows: a guide to theory, practice and algorithms / M. D. Gunzburger. – Academic Press, 1989. – 145 p. **19.** Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems / Saad Y. –SIAM, 2003. – 517 p. **20.** Grinevich P. P. An iterative method for the Stokes type problem with variable viscosity / P. P. Grinevich, M. A. Olshanskii // J. on Scientific Comput. – 2009. – V. 31, № 5. – Pp. 3959-3978. **21.** Liu X. Radial point collocation method for solution convection-diffusion problems/ X.Liu // J. Zhejiang Univ. Science A. – 2006. – V. 7 (6). – Pp. 1862-1875. **22.** Zhang X. Least-squares collocation meshless method. / X. Zhang, X.-H. Liu, K.-Z. Song, M.-W. Lu // Int. J. Numer. Methods Engin. – 2001. – V. 51. – Pp. 1089-1100.

Рецензент: д.т.н., професор Власюк А. П. (НУВГП)