



УДК 519.612

С.Е. Саух, д-р техн. наук

Ин-т проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова НАН Украины
(Украина, 03164, Киев, ул. Генерала Наумова, 15,
e-mail: ssaukh@gmail.com)

Применение неполной столбцово-строчной факторизации матриц в квазиньютоновских методах решения вариационных неравенств большой размерности

Обоснована необходимость применения метода неполной столбцово-строчной *ICR*-факторизации матриц в составе квазиньютоновских методов решения негладких систем алгебраических уравнений. Метод *ICR*-факторизации матриц обеспечивает возможность прямого решения аппроксимирующих систем уравнений Ньютона, что позволяет отказаться от применения итерационных методов их решения.

Обґрунтовано необхідність застосування методу неповної стовпцево-рядкової *ICR*-факторизації матриць у складі квазиньютонівських методів розв'язку негладких систем алгебраїчних рівнянь. Метод *ICR*-факторизації матриць забезпечує можливість прямого розв'язку апроксимуючих систем рівнянь Ньютона, що дозволяє відмовитись від застосування ітераційних методів їх розв'язку.

К л ю ч е в ы е с л о в а: вариационные неравенства, негладкие уравнения, разреженные матрицы, столбцово-строчная факторизация.

Вариационные неравенства большой размерности. Задача решения вариационных неравенств состоит в нахождении вектора $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}_C^n$ такого, что

$$\langle \mathbf{F}(\mathbf{x}^*), \mathbf{x} - \mathbf{x}^* \rangle \geq 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}_C^n, \quad (1)$$

где $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$ — скалярное произведение векторов $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ и $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$; \mathbf{F} — непрерывно дифференцируемая вектор-функция, $\mathbf{F}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$; \mathbb{R}_C^n — непустое замкнутое выпуклое множество, обычно имеющее вид

$$\mathbb{R}_C^n = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{H}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \mathbf{G}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0} \}. \quad (2)$$

Здесь дважды непрерывно дифференцируемые вектор-функции \mathbf{H} и \mathbf{G} такие, что $\mathbf{H}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n_H}$ и $\mathbf{G}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n_G}$ [1—4].

© С.Е. Саух, 2015

Решение задачи (1), (2) удовлетворяет условиям оптимальности Каруша—Куна—Таккера [1] и поэтому совпадает с решением смешанной системы равенств и комплементарных неравенств вида

$$\begin{aligned} \mathbf{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{H}(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} \leq \boldsymbol{\mu} \perp \mathbf{G}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (3)$$

где вектор-функция Лагранжа

$$\mathbf{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) - \left(\frac{d\mathbf{H}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right)^T \boldsymbol{\lambda} - \left(\frac{d\mathbf{G}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right)^T \boldsymbol{\mu}$$

является функцией $\mathbf{L}(\mathbf{w})$ трех векторных неизвестных $\mathbf{w} = (\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$, включая множители $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbf{R}^{n_H}$ и $\boldsymbol{\mu} \in \mathbf{R}_+^{n_G}$.

Используя C -функции [1, 3, 5, 6], в частности функцию Фишера—Бурмейстера $\varphi_{\text{FB}}: \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}$ вида $\varphi_{\text{FB}}(a, b) = \sqrt{a^2 + b^2} - a - b$, систему (3) можно тождественно преобразовать в систему негладких уравнений:

$$\Phi(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} \mathbf{L}(\mathbf{w}) \\ \mathbf{H}(\mathbf{x}) \\ \varphi_{\text{FB}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{G}(\mathbf{x})) \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (4)$$

Таким образом, поиск искомого решения $\mathbf{x}^* \in \mathbf{R}_C^n$ задачи (1), (2) сводится к поиску решения $\mathbf{w}^* = (\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \in \mathbf{R}^{n+n_H+n_G}$ нелинейной негладкой системы алгебраических уравнений (4).

Решение системы уравнений (4) осуществляется итерационными методами квазиньютоновского типа, глобальную сходимость которых обеспечивают методы оценочных функций, поиска линий, поиска пути, доверительной области и др. [1, 2]. При этом для дифференцирования C -функций и построения обобщенных якобианов Кларка используют методы негладкого анализа [1—3, 5], а негладкую вектор-функцию $\Phi(\mathbf{w})$ в окрестностях итерационной последовательности точек $\{\mathbf{w}_s | s=0, 1, \dots\}$ представляют множеством линейных вектор-функций

$$\{\Phi_s(\mathbf{w}) = \Phi(\mathbf{w}_s) + \Phi_w \Delta \mathbf{w}_s | s=0, 1, \dots\}, \quad (5)$$

где

$$\Phi(\mathbf{w}_s) = \begin{pmatrix} \mathbf{L}(\mathbf{w}_s) \\ \mathbf{H}(\mathbf{x}_s) \\ \varphi_{\text{FB}}(\boldsymbol{\mu}_s, \mathbf{G}(\mathbf{x}_s)) \end{pmatrix}, \quad \Delta \mathbf{w}_s = \begin{pmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{x}_s \\ \boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_s \\ \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}_s \end{pmatrix},$$

$$\Phi_w = \begin{bmatrix} L_x & -H_x^T & -G_x^T \\ H_x & 0 & 0 \\ \Phi_G G_x & 0 & \Phi_\mu \end{bmatrix},$$

$$\Phi_G = \text{diag} \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{g_i(\mathbf{x})}{\sqrt{\mu_i^2 + [g_i(\mathbf{x})]^2}} - 1, \mu_i g_i(\mathbf{x}) \neq 0 \right) \\ -1, \mu_i g_i(\mathbf{x}) = 0 \end{array} \right\}, i = \overline{1, n_G}, \left. \begin{array}{l} \mathbf{x} = \mathbf{x}_s \\ \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_s \end{array} \right\},$$

$$\Phi_\mu = \text{diag} \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\mu_i}{\sqrt{\mu_i^2 + [g_i(\mathbf{x})]^2}} - 1, \mu_i g_i(\mathbf{x}) \neq 0 \right) \\ -1, \mu_i g_i(\mathbf{x}) = 0 \end{array} \right\}, i \in \overline{1, n_G}, \left. \begin{array}{l} \mathbf{x} = \mathbf{x}_s \\ \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_s \end{array} \right\},$$

$$H_x = \left. \frac{d\mathbf{H}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_s}, \quad G_x = \left. \frac{d\mathbf{G}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_s},$$

$$L_x = \left. \left(\frac{d\mathbf{F}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} - \frac{d^2\mathbf{H}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}^T d\mathbf{x}} \boldsymbol{\lambda} - \frac{d^2\mathbf{G}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}^T d\mathbf{x}} \boldsymbol{\mu} \right) \right|_{\mathbf{w}=\mathbf{w}_s}.$$

С помощью линейных функций (5) систему уравнений (4) аппроксимируют системами линейных алгебраических уравнений (систем уравнений Ньютона) вида

$$\{\Phi_w \Delta \mathbf{w}_s = -\Phi(\mathbf{w}_s) | s=0, 1, \dots\}, \quad (6)$$

откуда определяют направления $\{\Delta \mathbf{w}_s | s=0, 1, \dots\}$ поиска решения $\mathbf{w}^* = (\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \in \mathbb{R}^{n+n_H+n_G}$.

В случае большой размерности $n+n_H+n_G$ систем уравнений Ньютона (6) и больших уровней заполнения матриц Φ_w ненулевыми элементами получение численных решений $\Delta \mathbf{w}_s$ может быть существенно затруднено или окажется невозможным ввиду ограниченных вычислительных ресурсов. Поэтому вместо поиска точных решений $\Delta \mathbf{w}_s$ систем уравнений Ньютона (6) прибегают к поиску приближенных решений $\Delta \tilde{\mathbf{w}}_s$, удовлетворяющих системам уравнений вида

$$\{\Phi_w \Delta \tilde{\mathbf{w}}_s = -\Phi(\mathbf{w}_s) + \boldsymbol{\varepsilon}_s | s=0, 1, \dots\}. \quad (7)$$

При этом минимизируют невязки $\boldsymbol{\varepsilon}_s$ так, чтобы их евклидовы нормы были меньше ε , т.е. верхней границы приемлемых норм невязок. Для минимизации невязок $\boldsymbol{\varepsilon}_s$ в [5] использованы методы подпространств Крылова: квазиминимизации невязок (QMR и TFQMR), сопряженных градиентов

где N — множество вида $\{1, 2, \dots, m\}$; $\mathbf{A}_{(-i_k, -j_k)}(i_k, :) = \mathbf{0}^T$ и $\mathbf{A}_{(-i_k, -j_k)}(:, j_k) = \mathbf{0}$ — нулевые вектор-строка и вектор-столбец матрицы $A_{(-i_k, -j_k)}$, формируемой на k -м шаге вычислений.

Поскольку в формируемых матрицах $\{A_{(-i_k, -j_k)} | k=1, 2, \dots, m\}$ столбцы с номерами $\{j_k | k=1, 2, \dots, m\}$ и строки с номерами $\{i_k | k=1, 2, \dots, m\}$ являются нулевыми, итоговая матрица также будет нулевой, т.е. $A_{(-i_m, -j_m)} \equiv 0$.

Элементы $\{c_{i_k j_k} | k=1, 2, \dots, m\}$ и $\{r_{i_k j_k} | k=1, 2, \dots, m\}$ вектор-столбцов $\{\mathbf{C}_{j_k} | k=1, 2, \dots, m\}$ и вектор-строк $\{\mathbf{R}_{i_k} | k=1, 2, \dots, m\}$ легко определяются по ведущим элементам $\{A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k) | k=1, 2, \dots, m\}$ преобразуемых матриц $\{A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})} | k=1, 2, \dots, m\}$, где $A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})} = A | k=1$. Элементы $c_{i_k j_k}$ и $r_{i_k j_k}$, удовлетворяющие равенству $c_{i_k j_k} r_{i_k j_k} = A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)$, находим, предполагая, что $c_{i_k j_k} = 1$ и $r_{i_k j_k} = A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)$ либо $r_{i_k j_k} = 1$ и $c_{i_k j_k} = A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)$.

Из соотношений (1) следует равенство

$$A = \sum_{k=1}^m \mathbf{C}_{j_k} \mathbf{R}_{i_k} = CR, \quad (9)$$

где матрицы C и R образованы из вектор-столбцов $\{\mathbf{C}_{j_k} | k=1, 2, \dots, m\}$ и вектор-строк $\{\mathbf{R}_{i_k} | k=1, 2, \dots, m\}$ посредством их размещения в порядке возрастания значений индекса $k=1, 2, \dots, m$. Заметим, что при организации машинных вычислений подобное упорядоченное размещение указанных выше групп векторов не выполняется, а вычисляемые на k -м шаге векторы \mathbf{C}_{j_k} и \mathbf{R}_{i_k} размещаются непосредственно в областях памяти, в которых образуются нуль-векторы $\mathbf{A}_{(-i_k, -j_k)}(:, j_k) = \mathbf{0}$ и $\mathbf{A}_{(-i_k, -j_k)}(i_k, :) = \mathbf{0}^T$.

Основное преимущество метода CR -факторизации над существующими заключается в адаптивности выражений (8), (9) к позиционированию выбираемых ведущих элементов. Поскольку использование специальных схем хранения разреженных матриц сопряжено с необходимостью выполнения множества неарифметических операций для получения доступа к матричным элементам, отсутствие в методе CR -факторизации перестановок строк и столбцов приводит к существенному сокращению объема вычислений (в среднем на треть).

Устойчивость метода CR -факторизации матриц. Соотношения (8) определяют итерационный характер формул CR -факторизации матриц с числом итераций m . В случае матриц большой размерности такая последовательная цепь вычислений может приводить к существенному накоплению ошибок. Поэтому для обеспечения устойчивости вычислительного процесса на k -м шаге факторизации следует выбирать ведущий элемент так, чтобы минимизировать влияние произведения $\mathbf{C}_{j_k} \cdot \mathbf{R}_{i_k}$ на матрицу

$A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}$, из которой образуется матрица $A_{(-i_k, -j_k)}$. Следовательно, поиск ведущего элемента $a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)$ в матрице $A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}$ необходимо выполнять в соответствии с требованием получения таких множителей \mathbf{C}_{j_k} и \mathbf{R}_{i_k} , которые имеют минимально возможную норму

$$\|A_{(-i_k, -j_k)} - A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}\| = \|\mathbf{C}_{j_k} \cdot \mathbf{R}_{i_k}\| \leq \|\mathbf{C}_{j_k}\| \cdot \|\mathbf{R}_{i_k}\| \rightarrow \min_{(i_k, j_k)}. \quad (10)$$

Здесь $\|\cdot\|$ — октаэдральная норма матрицы либо вектора. Выбор именно такой нормы объясняется простотой алгоритма ее вычисления и, что самое главное, устойчивостью получаемых результатов к вычислительным ошибкам. Поскольку

$$\|\mathbf{C}_{j_k}\| = \sum_i |c_{ij_k}| = \frac{\sum_i |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j_k)|}{|r_{i_k j_k}|}, \quad (11)$$

$$\|\mathbf{R}_{i_k}\| = \sum_j |r_{i_k j}| = \frac{\sum_j |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j)|}{|c_{i_k j_k}|}, \quad (12)$$

$a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k) = c_{i_k j_k} r_{i_k j_k}$ и при этом j_k -столбец и i_k -строка матрицы $A_{(-i_k, -j_k)}$ являются нулевыми, из (10) с учетом (8) получаем выражение:

$$\begin{aligned} & (\|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, *)\| - \\ & - |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)|) \frac{\|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(*, j_k)\| - |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)|}{|a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)|} \rightarrow \min_{(i_k, j_k)}, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, *)\| = \sum_j |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j)|,$$

$$\|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(*, j_k)\| = \sum_i |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j_k)|.$$

Критерий (13) прост в реализации, так как определение входящих в него норм осуществляется рекуррентно и не требует значительных вычислительных затрат. Кроме того, для поиска ведущего элемента $a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j_k)$ нет необходимости выполнять оценку функционала в (13) для всех элементов матрицы $A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}$. Поиск ведущего элемента достаточно осуществить в $m_k \ll m$ ненулевых строках матрицы $A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}$, содержащих наименьшее число ненулевых элементов. Такой способ поиска ведущего элемента не только обеспечивает устойчивость вычислений, но и уменьшает различие между шаблонами матриц $A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}$ и $A_{(-i_k, -j_k)}$.

Метод ICR-факторизации матриц. Обращаясь к рекуррентным соотношениям вида (8), определяем условия, при которых на k -м шаге факторизации можно пренебречь влиянием отдельных элементов столбца \mathbf{C}_{j_k} и строки \mathbf{R}_{i_k} формируемых факторных матриц \mathbf{C} и \mathbf{R} на матрицу $A_{(-i_k, -j_k)}$. Очевидно, в случае несопоставимости строчных и столбцовых октаэдральных норм соответствующих векторов, а именно

$$|c_{ij_k}| \cdot \|\mathbf{R}_{i_k}\| \ll \|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, *)\| \quad (14)$$

и

$$|r_{i_k j}| \cdot \|\mathbf{C}_{j_k}\| \ll \|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(*, j)\|, \quad (15)$$

элементы c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ оказываются несущественными и можно полагать, что они равны нулю. Для оценивания значимости элементов c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ нет необходимости в предварительном вычислении столбца \mathbf{C}_{j_k} и строки \mathbf{R}_{i_k} , так как выражения (14) и (15), с учетом (11) и (12), можно представить в тождественном виде:

$$\frac{|c_{ij_k}|}{|c_{i_k j_k}|} \ll \frac{\|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, *)\|}{\|A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, *)\|} = \frac{\sum_j |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j)|}{\sum_j |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j)|}, \quad (16)$$

$$\frac{|r_{i_k j}|}{|r_{i_k j_k}|} \ll \frac{\|A_{(-i_k, -j_k)}(*, j)\|}{\|A_{(-i_k, -j_k)}(*, j_k)\|} = \frac{\sum_i |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j)|}{\sum_i |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j_k)|}. \quad (17)$$

Полученные соотношения позволяют оценивать значимость элементов столбца \mathbf{C}_{j_k} и строки \mathbf{R}_{i_k} , основываясь только на соотношениях между нормами соответствующих строк и столбцов матрицы $A_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}$. Параметризация выражений (16) и (17) позволяет представить их в виде

$$\frac{|c_{ij_k}|}{|c_{i_k j_k}|} < \tau \frac{\sum_j |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j)|}{\sum_j |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i_k, j)|}, \quad (18)$$

$$\frac{|r_{i_k j}|}{|r_{i_k j_k}|} < \tau \frac{\sum_i |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j)|}{\sum_i |a_{(-i_{k-1}, -j_{k-1})}(i, j_k)|}, \quad (19)$$

удобном для практического использования. Априори задаваемое значение параметра τ устанавливает границу раздела элементов c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ на значимые

и незначимые. В процессе факторизации значимые элементы сохраняются в столбцах $\tilde{C}_{j_k}(\tau)$ и строках $\tilde{R}_{i_k}(\tau)$, образуя матрицы $\tilde{C}(\tau)$ и $\tilde{R}(\tau)$.

Тождественность выражений (18) и (19) выражениям (14) и (15) позволяет интерпретировать отброшенные малозначимые элементы c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ в формулах (8) как ошибки машинных вычислений, а параметр τ рассматривать в качестве обобщенной характеристики таких ошибок. Заметим, что для факторных множителей $\tilde{C}(\tau)$ и $\tilde{R}(\tau)$ справедливыми являются предельные выражения вида

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \tilde{C}(\tau) = C, \quad \lim_{\tau \rightarrow 0} \tilde{R}(\tau) = R. \quad (20)$$

Метод, основанный на формулах (8) CR -факторизации матриц с выбором ведущих элементов в соответствии с критерием (10) и пренебрежением элементов факторных матриц, удовлетворяющих условиям (18) и (19), является методом неполной столбцово-строчной ICR -факторизации матриц.

Решение систем уравнений Ньютона методом ICR -факторизации матриц. Применяя методы CR - и ICR -факторизации матриц Φ_w , входящих в системы уравнений Ньютона (6), находим соответственно

$$\Phi_w = C_s R_s \text{ и } \Phi_w = \tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau) + \Delta\Phi_s(\tau), \quad (21)$$

где матрица ошибок ICR -факторизации определяется выражением $\Delta\Phi_s(\tau) = C_s R_s - \tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau)$. С помощью факторизованных матриц (21) представим системы уравнений (6) в виде

$$\{\tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau) \Delta w_s = -\Phi(w_s) - \Delta\Phi_s(\tau) \Delta w_s \mid s=0, 1, \dots\}. \quad (22)$$

Принимая во внимание (20), запишем предельное выражение для матрицы ошибок вида $\lim_{\tau \rightarrow 0} \Delta\Phi_s(\tau) = 0$. Анализ соотношений (10) и (14), (15) свидетельствуют о том, что для любого достаточно малого значения $\tau > 0$ справедливо неравенство

$$\|\Delta\Phi_s(\tau)\| \ll \|\tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau)\|. \quad (23)$$

Это означает, что искомые решения $\{\Delta w_s \mid s=0, 1, \dots\}$ систем вида (22) можно оценить приближенно решениями $\{\Delta \tilde{w}_s \mid s=0, 1, \dots\}$ систем уравнений вида

$$\{\tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau) \Delta \tilde{w}_s = -\Phi(w_s)_s \mid s=0, 1, \dots\}. \quad (24)$$

Для оценки погрешностей таких решений вычтем уравнения (24) из соответствующих уравнений (22) и после несложных преобразований получим

$$\{\Delta w_s - \Delta \tilde{w}_s = (\tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau))^{-1} \Delta\Phi_s(\tau) \Delta w_s \mid s=0, 1, \dots\}.$$

С учетом (23) и неравенства

$$\|(\tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau))^{-1} \Delta \Phi_s(\tau)\| \leq \|(\tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau))^{-1}\| \cdot \|\Delta \Phi_s(\tau)\|,$$

справедливого для произведения норм любых двух матриц, окончательно получаем искомые оценки погрешностей в виде

$$\{\|\Delta \mathbf{w}_s - \Delta \tilde{\mathbf{w}}_s\| \leq \delta_s(\tau) \|\Delta \mathbf{w}_s\| \mid s=0, 1, \dots\}, \quad (25)$$

где $\delta_s(\tau) = \|(\tilde{C}_s(\tau) \tilde{R}_s(\tau))^{-1}\| \cdot \|\Delta \Phi_s(\tau)\| \ll 1$.

Анализируя выражение (25), содержащее оценки верхних границ погрешностей приближенных решений $\{\Delta \tilde{\mathbf{w}}_s \mid s=0, 1, \dots\}$ систем уравнений (24), видим основное преимущество метода *ICR*-факторизации матриц Φ_w , а именно возможность формирования предобусловливателей, позволяющих получать близкие к точным решения систем уравнений Ньютона. Поскольку метод *ICR*-факторизации обеспечивает минимальные погрешности аппроксимации матриц Φ_w факторными множителями $\tilde{C}_s(\tau)$ и $\tilde{R}_s(\tau)$, его можно использовать вместо, а не в составе итерационных методов минимизации невязок в уравнении (7), что позволяет существенно сократить затраты вычислительных ресурсов при решении вариационных неравенств большой размерности.

Результаты экспериментальных исследований. В качестве тестового примера рассмотрена задача о препятствии [11], состоящая в нахождении положения равновесия упругой мембраны, которая

- а) проходит через пустотелые участки жесткой решетки, лежащей в горизонтальной плоскости координат,
- б) находится под действием «вертикальной» равномерно распределенной силы,
- в) удерживается вблизи ребер решетки в пределах допустимого отклонения от них.

Задача о препятствии имеет различные математические формулировки, в том числе в виде смешанной задачи дополненности, которая тождественна соотношениям (3). На рисунке (см. вклейку) представлены формы, принимаемые упругой мембраной под воздействием равномерно распределенных сил.

В вычислительных экспериментах область, охватываемая жесткой решеткой, представляла собой $n \times n$ квадрат с n дискретными точками на стороне. Таким образом, общее число искомых переменных, включая лагранжевы множители, составляло $N = 3 \times n \times n$.

Решение задачи выполнялось с помощью известного приложения P4TH и оригинального приложения ICRS с параметром смещения малых

элементов матричных компонент обобщенных якобианов Кларка $\delta = 10^{-5}$ [8] и параметром *ICR*-факторизации $\tau = 10^{-4}$. Полученные результаты представлены в табл. 1, из которой видно подтверждение основного мотивационного положения исследования [3] о непригодности приложения РАТН для решения задач большой размерности. Прочерки в табл. 1 указывают на невозможность получения решений соответствующих задач.

Таблица 1

n	N	PATH		ICRS		ICRS&GMRES	
		itr	time, c	itr	time, c	itr	time, c
100	30 000	12	2,3	14	5,5	14	6,8
150	67 500	16	10,8	20	18,1	21	25,6
200	120 000	21	36,0	24	45,4	26	67,2
300	270 000	31	200,7	30	167,5	35	266,4
400	480 000	41	681,1	38	462,6	44	744,4
500	750 000	51	1819,2	42	914,8	51	1581,0
600	1 080 000	—	—	59	2115,5	60	3046,4
700	1 470 000	—	—	71	3894,8	72	5409,8
800	1 920 000	—	—	79	5731,4	81	8878,2
900	2 430 000	—	—	86	8298,0	90	13521,3
1000	3 000 000	—	—	93	9761,8	100	20536,0

Таблица 2

n	Число ненулевых элементов матриц		
	Φ_w	$\tilde{C}_0(\tau)$ и $\tilde{R}_0(\tau)$	\tilde{L}_0 и \tilde{U}_0
100	109 600	220 709	274 555
200	439 200	891 900	1 198 504
300	988 800	2 014 683	2 798 879
400	1 758 400	3 584 375	5 104 351
500	2 748 000	5 604 651	8 183 344
600	3 957 600	8 079 688	12 029 746
700	5 387 200	10 996 586	16 594 693
800	7 036 800	14 371 746	—
900	8 906 400	18 205 441	—
1000	10 996 000	22 463 848	—

Следует заметить, что высокая скорость сходимости квазиньютоновских итераций (itr), реализуемых приложением ICRS, сопоставима с аналогичным показателем работы приложения PATH. Кроме того, приложение ICRS требует значительно меньших затрат времени на решение задач большой размерности, что подтверждает целесообразность построения и использования факторных множителей $\tilde{C}_s(\tau)$ и $\tilde{R}_s(\tau)$ для прямого метода решения систем уравнений Ньютона вида (24), а не для предобусловленного итерационного метода GMRES(m) решения систем уравнений Ньютона вида (6), реализованного в приложении ICRS&GMRES. В экспериментах значение параметра m в методе GMRES было установлено равным 10, кроме случая $n=1000$, когда принято $m=5$.

Примененный метод ICR-факторизации матриц Φ_w требует существенно меньших объемов памяти для размещения ненулевых элементов матриц $\tilde{C}_s(\tau)$ и $\tilde{R}_s(\tau)$ по сравнению с объемами памяти, которые нужны для размещения ненулевых элементов матриц \tilde{L}_s и \tilde{U}_s в известном методе LLU-факторизации матриц Φ_w . Об этом свидетельствуют результаты вычислительных экспериментов, приведенные в табл. 2, в которой суммарное число ненулевых элементов матриц $\tilde{C}_0(\tau)$ и $\tilde{R}_0(\tau)$ сформировано с помощью приложения ICRS, а матриц \tilde{L}_0 и \tilde{U}_0 — с помощью приложения MINOS [3]. Все вычислительные эксперименты выполнены на компьютере Intel P4 (Chipset Intel 865 PE, FSB 800 MHz, CPU 3.0GHz with HT, Dual Channel Memory 2GB, DDR400), управляемом операционной системы Microsoft Windows XP.

Выводы

Применение метода неполной столбцово-строчной факторизации матриц в составе квазиньютоновских методов решения негладких систем уравнений позволяет осуществлять приближенное решение систем уравнений Ньютона с достаточно малой погрешностью. В результате появляется возможность замены традиционно используемых итерационных методов минимизации невязок систем уравнений Ньютона прямым методом решения аппроксимирующих систем уравнений с факторизованными матрицами. Использование методов неполной столбцово-строчной факторизации матриц и прямого решения аппроксимирующих систем уравнений Ньютона позволяет существенно сократить объем вычислительных ресурсов, необходимых для решения вариационных неравенств большой размерности. Разработанное на новой методической основе приложение ICRS по своим возможностям значительно превосходит известные приложения, в том числе широко используемое приложение PATH.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Facchinei F., Pang J.-S.* Finite-dimensional Variational Inequalities and Complementarity Problems. Vol. I. — Springer, 2003. — 728 p.
2. *Facchinei F., Pang J.-S.* Finite-dimensional Variational Inequalities and Complementarity Problems. Vol. II. — Springer, 2003. — 728 p.
3. *Ruggiero V., Tinti F.* A preconditioner for solving large scale variational inequality problems by a semismooth inexact approach // Intern. J. of Computer Mathematics. — 2006. — No 10. — P. 723—739.
4. *Petra S.* Semismooth Least Squares Methods for Complementarity Problems: Ph.D. Thesis. — Wurzburg, 2008. — 162 p. — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http://www.opus-bayern.de/uni-wuerzburg/volltexte/2006/1866/pdf/dissertation_petra.pdf.
5. *Kanzow C.* Inexact Semismooth Newton Methods for Large-Scale Complementarity Problems. Preprint 249. Institute of Applied Mathematics and Statistics. — Wurzburg, 2003. — 22 p. — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.mathematik.uni-wuerzburg.de/~kanzow/paper/InSemiP.pdf>.
6. *Fischer A.* A special Newton-type optimization method // Optimization. — 1992. — Vol. 24. — No 3—4. — P. 269—284.
7. *Saad Y.* Iterative Methods for Sparse Linear Systems. — Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003. — 548 p.
8. *Саух С.Е.* Метод смещения малых элементов в обобщенных якобианах Кларка для обеспечения численной устойчивости квазиньютоновских методов решения вариационных неравенств // Электрон. моделирование. — 2015. — 37, № 4. — С. 3—18.
9. *Саух С.Е.* Метод CR-факторизации матриц большой размерности // Там же. — 2007. — 29, № 6. — С. 3—20.
10. *Саух С.Е.* Неполная столбцово-строчная факторизация матриц для итерационного решения больших систем уравнений // Там же. — 2010. — 32, № 6. — С. 3—14.
11. *Tinti F.* VIPLIB: A matlab collection of variational inequality problems // Technical report, available at — [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://dm.unife.it/tinti/VIPs/test-problems.html>, 2003 [accessed July 31, 2015].

S.Ye. Saukh

APPLICATION OF INCOMPLETE COLUMN-ROW FACTORIZATION
OF MATRICES IN QUASI-NEWTON METHODS FOR SOLVING
LARGE-SCALE VARIATIONAL INEQUALITY PROBLEMS

The need of using the method of incomplete column-row (*ICR*) is substantiated. *ICR* method is the method of factorization of matrices in the composition with quasi-Newton methods for solving nonsmooth algebraic systems of equations. The factorization method enables direct solution of approximated systems of Newton's equations and eliminates the use of iterative methods for approximate solving initial systems of Newton's equations.

Keywords: variational inequality problems, non-smooth equations, sparse matrix, column-row factorization.

REFERENCES

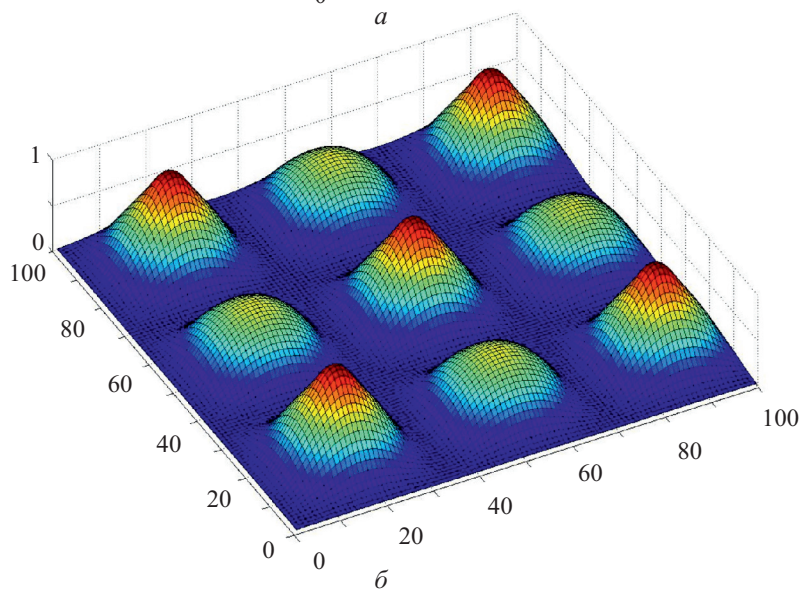
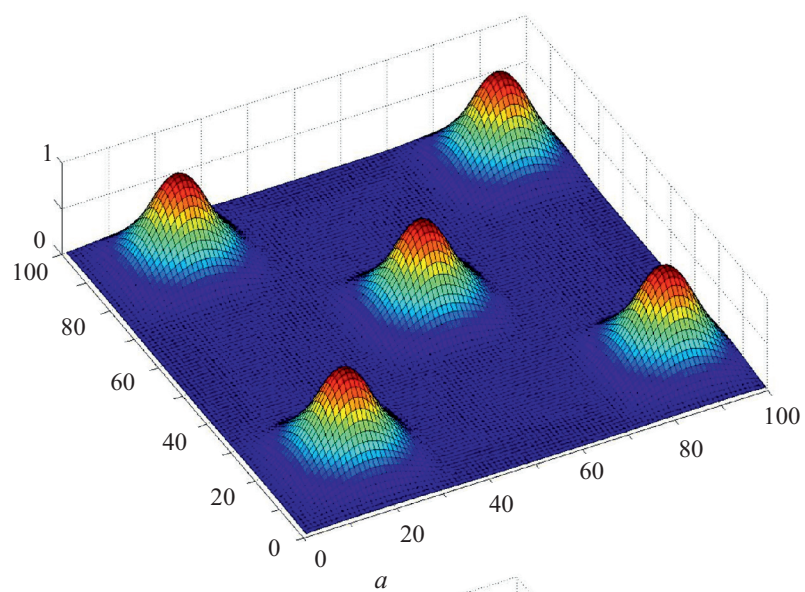
1. Facchinei, F. and Pang, J.-S. (2003), Finite-Dimensional Variational Inequalities and Complementarity Problems, Vol. I., Springer, New York, USA.
2. Facchinei, F. and Pang, J.-S. (2003), Finite-Dimensional Variational Inequalities and Complementarity Problems, Vol. II., Springer, New York, USA.

3. Ruggiero, V. and Tinti, F. (2006), “A preconditioner for solving large scale variational inequality problems by a semismooth inexact approach”, *Intern. Journal of Computer Mathematics*, no. 10, pp. 723-739.
4. Petra, S. (2008), “Semismooth Least Squares Methods for Complementarity Problems”, Ph.D. Thesis, Wurzburg, available at: http://www.opus-bayern.de/uni-uerzburg/volltexte/2006/1866/pdf/dissertation_petra.pdf.
5. Kanzow, C. (2003), “Inexact Semismooth Newton Methods for Large-Scale Complementarity Problems”, Wurzburg, Institute of Applied Mathematics and Statistics, available at: <http://www.mathematik.uni-wuerzburg.de/~kanzow/paper/InSemiP.pdf>.
6. Fischer, A. (1992), “A special Newton-type optimization method”, *Optimization*, Vol. 24, no. 3-4, pp. 269-284.
7. Saad, Y. (2003), *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, USA.
8. Saukh, S.Ye. (2015), “Method of shearing matrix elements of the Clarke’s generalized Jacobian for providing numerical stability of the quasi-Newton methods of solving of the variational inequalities”, *Elektronnoe modelirovanie*, Vol. 37, no. 4, pp. 13-18.
9. Saukh, S.Ye. (2007), “CR-factorization method for large-scale matrices”, *Elektronnoe modelirovanie*, Vol. 29, no. 6, pp. 3-22.
10. Saukh, S.Ye. (2010), “Incomplete column-row factorization of matrices for solving of large-scale system of equations”, *Elektronnoe modelirovanie*, Vol. 32, no. 6, pp. 3-14.
11. Tinti, F. (2003), “VIPLIB: A matlab collection of variational inequality problems”, available at: <http://dm.unife.it/tinti/VIPs/test-problems.html> (accessed July 31, 2015).

Поступила 04.08.15

САУХ Сергей Евгеньевич, д-р техн. наук, гл. науч. сотр. Ин-та проблем моделирования в энергетике им. Г.Е.Пухова НАН Украины. В 1978 г. окончил Киевский ин-т инженеров гражданской авиации. Область научных исследований — численные операторные методы решения дифференциальных уравнений, методы и технологии решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности, методы решения вариационных неравенств, равновесные модели, математическое моделирование энергорынков, газотранспортных систем, макроэкономических процессов.

К статье С.Е. САУХА



Формы, принимаемые упругой мембраной под воздействием равномерно распределенных сил плотностью 1 (*a*) и плотностью 100 (*б*) в случае препятствия в виде жесткой решетки с ячейками 3×3