Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 419, 2013 г.

Р. Р. Ахунов, С. П. Куксенко, В. К. Салов, Т. Р. Газизов

МНОГОКРАТНОЕ РЕШЕНИЕ СЛАУ С ЧАСТИЧНО ИЗМЕНЯЮЩЕЙСЯ МАТРИЦЕЙ ИТЕРАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

§1. Введение

Существует ряд задач, в которых требуется многократное решение системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$, что резко увеличивает временные затраты. Однако если изменяются не все, а только определенные элементы матрицы СЛАУ, то можно ускорить её решение. Так, описаны [1] усовершенствования алгоритма вычисления емкостных матриц одной и той же структуры при многократном изменении значения диэлектрической проницаемости и рассмотрено [2, 3] использование этих усовершенствований в системе TALGAT [4] на практических задачах. Данный алгоритм основан на блочном представлении матрицы и использовании LU-разложения. Он использует то обстоятельство, что изменение элементов матрицы СЛАУ происходит только в нижней части главной диагонали. Чем меньше изменяющихся элементов, тем быстрее повторные вычисления.

Метод решения СЛАУ на основе LU-разложения, относится к классу прямых методов, вычислительные затраты которых пропорциональны N^3 (N – порядок матрицы), что существенно ограничивает использование таких методов на практике. Из этого следует, что использовать итерационные методы может быть выгоднее, поскольку их

Ключевые слова: многократное решение, система линейных алгебраических уравнений, итерационный метод, предобусловливание.

Работа выполнена по договору от 16.11.2012 No. 96/12 ТУСУРа и ОАО “ИСС” им. акад. М. Ф. Решетнева в рамках реализации постановления Правительства РФ от 09.04.2010 г. No. 218, договор от 12.02.2013 г. No. 02.G25.31.0042.

затраты обычно пропорциональны N^2. Для уменьшения вычислительных затрат и ускорения сходимости итерационных методов применяют предобусловливание, которое заключается в использовании дополнительной матрицы $\mathbf{M}$ (матрицы предобусловливания), полученной из исходной матрицы путем некоторых приближений и преобразований [5, 6]. Преобразованную СЛАУ можно представить в виде $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$.

Если при многократном решении СЛАУ исходная матрица изменяется частично, использование одного предобусловливателя для решения всех СЛАУ позволяет ускорить общее решение. Авторам неизвестны работы, в которых бы детально исследовалась эффективность этого подхода. Между тем, если, пользуясь системным подходом, рассматривать систему (решение одиночной СЛАУ) с учетом надсистемы (многократное решение СЛАУ), то можно выявить не только очевидные, но и скрытые ресурсы ускорения решения СЛАУ, например, связанные именно со спецификой итерационных методов.

Цель данной работы – исследовать возможность ускорения многократного решения СЛАУ с частично изменяющейся матрицей итерационным методом. Для этого представляется целесообразным: рассмотреть алгоритм такого решения и возможность аналитической оценки его ускорения; выявить дополнительные ресурсы ускорения; провести вычислительный эксперимент.

§2. Алгоритм многократного решения СЛАУ итерационным методом

В данной работе в качестве метода формирования матрицы $\mathbf{M}$ использовалась предфильтрация, основанная на нормах строк, и ILU(0)-разложение матрицы $\mathbf{A}$ [7]. Предфильтрация необходима для того, чтобы получить разреженную матрицу $\mathbf{A}_S$ из плотной исходной матрицы $\mathbf{A}$. Так, перед преобразованием каждой строки вычисляется её норма, затем умножением полученного значения на задаваемое значение допуска обнуления τ получается значение порога обнуления. Далее, если значение какого-либо элемента преобразуемой строки меньше данного порога, то этот элемент полагается нулём. Затем, для матрицы $\mathbf{A}_S$ вычисляется ILU(0)-разложение, и в результате формируется матрица $\mathbf{M}$. (Важный вопрос о существовании ILU(0)-разложения для рассматриваемых матриц здесь не исследуется, поскольку он не является специфичным именно для многократного решения СЛАУ.)

Наконец, выполняются итерации до получения вектора решения $\mathbf{x}$ с заданной точностью. Таким образом, алгоритм для m-кратного решения СЛАУ с помощью итерационного метода с предобусловливанием является следующим:

Алгоритм 1 Многократное решение СЛАУ итерационным методом с предобусловливанием.

1 Получить матрицу $\mathbf{A}_S$ из матрицы $\mathbf{A}_1$ с помощью предфильтрации
2 Вычислить матрицу $\mathbf{M}$ из матрицы $\mathbf{A}_S$ с помощью ILU(0)
3 Для i от 1 до m
4 Итерационно вычислить $\mathbf{x}_i$ из уравнения $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}_i\mathbf{x}_i = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$ с заданной точностью
5 Увеличить i

§3. Аналитические оценки ускорения и их следствия

Оценим возможное ускорение от применения итерационного метода. Если представить его отношением (β) общего времени решения m СЛАУ прямым методом (T_D) ко времени вычисления по алгоритму 1, то получим

$$\beta = \frac{mT_D}{T_P + \sum\limits_{i=1}^{m} T_i}, \tag{1}$$

где T_P – время, затрачиваемое на формирование матрицы предобусловливания; T_i – время итерационного вычисления $\mathbf{x}_i$ с заданной точностью. Предположим, что при решении отдельных СЛАУ T_i существенно не меняется и, в среднем, равно T_A. Тогда из (1) получим усредненное ускорение

$$\beta_A = \frac{mT_D}{T_P + mT_A} \tag{2}$$

и оценку максимального усредненного ускорения

$$\beta_A^{\max} = \lim_{m\to\infty} \frac{mT_D}{T_P + mT_A} = \frac{T_D}{T_A}. \tag{3}$$

Формулы (1)–(3) имеют важные следствия.

Следствие 1. *Чем больше число решаемых СЛАУ, тем меньше ускорение зависит от времени построения предобусловливания, а значит, от выбора вида предобусловливания, способа предфильтрации и оптимального значения допуска обнуления.*

Следствие 2. *Поскольку максимальное усредненное ускорение обратно пропорционально среднему времени итерационного процесса, то актуально уменьшение времени одной итерации и числа итераций.*

§4. Выбор допуска обнуления и начального приближения

При использовании предобусловливания время итерационного процесса зависит от значения τ: чем оно меньше, тем, вообще говоря, итерационный процесс быстрее. Это происходит за счет формирования более плотной матрицы $\mathbf{M}$, что, как правило, ведет к уменьшению числа итераций [7]. Оно, очевидно, минимально при τ=0.

Еще одним параметром, влияющим на время итерационного процесса, является начальное приближение $\mathbf{x}^0$. В данной работе сравнивались два варианта его выбора: фиксированное начальное приближение (все элементы начального приближения равны некоторому значению, в данной работе, единице), используемое для решения каждой СЛАУ; вектор решения предыдущей СЛАУ ($\mathbf{x}_i^0 = \mathbf{x}_{i-1}$). С этой целью полезно оценить изменение элементов текущей матрицы СЛАУ относительно первой. Так как, для рассматриваемой задачи, изменяющиеся элементы находятся на главной диагонали и равны между собой, рассматривались значения одного элемента матрицы. Зависимость изменения значений от m приведена на рис. 1. Видно, что изменение значений элементов СЛАУ с увеличением m становится меньше и не превышает 12%. Таким образом, для данной задачи представляется более выгодным использовать вектор решения предыдущей СЛАУ.

§5. Вычислительный эксперимент

Для вычислительного эксперимента использовался персональный компьютер (при вычислениях распараллеливание не использовалось, т.е. работало одно ядро процессора) со следующими параметрами: платформа – AMD FX(tm)-8320 Eight-Core Processor; частота процессора – 3,50 ГГц; объем ОЗУ – 16 Гбайт; число ядер – 8; операционная система – Windows 7 x64.

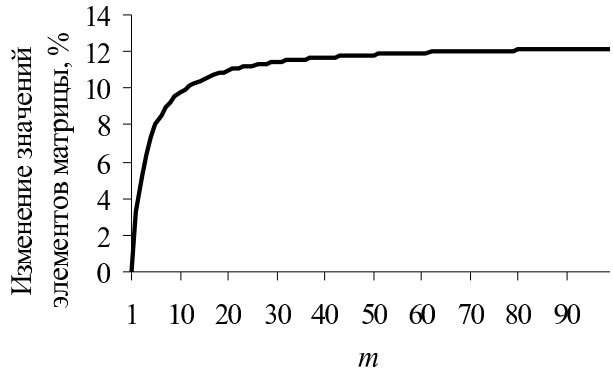

Рис. 1. Изменение значений элементов матрицы при m-кратном решении СЛАУ.

В качестве исследуемой использована простая структура (рис. 2). Целью моделирования являлась оценка временных затрат, необходимых для вычисления m емкостных матриц. В эксперименте использовалась одна структура, но посредством изменения сегментации границ проводников и диэлектрика были получены СЛАУ различных порядков. При вычислениях использовался алгоритм 1 с двумя вариантами выбора начального приближения, указанными выше. В качестве итерационного метода использовался метод Bi-CGSTAB [7], который хорошо зарекомендовал себя при решении СЛАУ, полученных с использованием метода моментов [6, 8]. Итерационный процесс продолжался, пока относительная норма вектора невязки была больше 10^{-6}. При оценке ускорения в качестве точного метода использовался метод Гаусса.

Выбор такого критерия остановки для данной задачи специально не исследовался. Однако примеры решения одиночных СЛАУ, возникающих в электродинамических задачах, как правило, гораздо хуже обусловленных, показывают, что относительная точность 10^{-6} по норме невязок обеспечивает 7–8 точных знаков после запятой в решении [5]. Как показали многочисленные эксперименты (на каждой из исследуемых матриц с учетом их изменения и обоих выборов начального приближения), максимальное абсолютное значение элементов разности векторов решения, полученных методом Гаусса и итерационным

методом, не превышает 10^{-4}. Между тем, для практики, как правило, приемлемая точность – 1–2 знака.

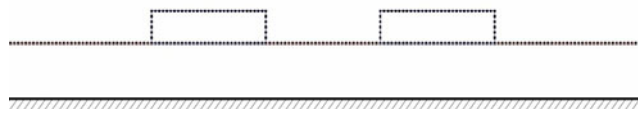

Рис. 2. Вид поперечного сечения исследуемой структуры (2 проводника на диэлектрической подложке над идеально проводящей плоскостью).

Результаты m-кратного решения СЛАУ с разными вариантами начального приближения приведены на рис. 3. Видно, что число итераций при фиксированном начальном приближении больше, чем при начальном приближении равном решению предыдущей СЛАУ. Таким образом, второй вариант может обеспечить большее ускорение. Однако в дальнейшем целесообразно исследовать более значительные изменения матриц СЛАУ, которые потребуют большего числа итераций.

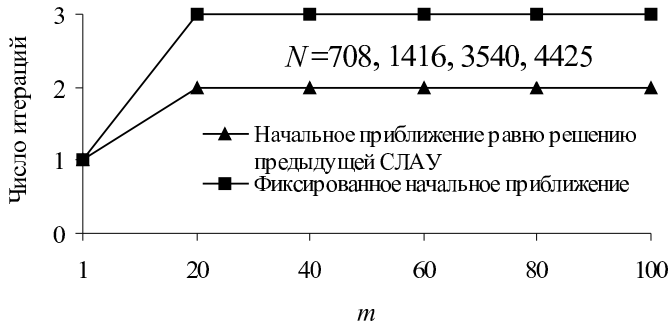

Рис. 3. Зависимости числа требуемых итераций на решение одной СЛАУ от m при разных вариантах начального приближения (совпадают для N=708, 1416, 3540, 4425).

Далее были проведены вычисления с целью оценить ускорение решения итерационным методом относительно метода Гаусса. Результаты для решения m СЛАУ (с разными N) с помощью алгоритма 1 сведены

в табл. 1. Они показывают ускорение при $m > 1$. С ростом m ускорение растет, достигая 49 для m=1000 при N=4425. В последней строке табл. 1 приведены значения, полученные по формуле (3). Видно, что к ним сходятся значения предыдущих строк. Также видно, что начальное приближение, равное вектору решения предыдущей СЛАУ, дает большее ускорение, чем фиксированное (в 1,4 раза при N=4425).

Таблица 1. Ускорение (относительно метода Гаусса) решения итерационным методом m СЛАУ с разными N.

	Фиксированное начальное приближение				Начальное приближение равно решению предыдущей СЛАУ			
m	N=708	N=1416	N=3540	N=4425	N=708	N=1416	N=3540	N=4425
1	0,36	0,51	0,52	0,31	0,36	0,51	0,52	0,31
5	1,37	2,15	2,43	1,52	1,53	2,27	2,49	1,53
10	2,12	3,65	4,53	2,93	2,52	4,00	4,74	2,98
100	4,12	9,58	20,53	18,09	5,70	12,74	24,82	20,42
1000	4,55	11,43	31,71	37,36	6,59	16,32	43,09	49,3
∞	4,61	11,69	33,78	42,43	6,71	16,86	46,96	58,59

§6. Заключение

Представлен алгоритм многократного решения СЛАУ с частично изменяющейся матрицей и постоянным вектором правой части итерационным методом и выведены простые формулы для аналитической оценки получаемого ускорения. Сформулированы их важные следствия, определяющие выбор параметров итерационного решения и возможности получения дополнительного ускорения. В качестве примера рассмотрен выбор допуска обнуления и начального приближения решения и выполнен вычислительный эксперимент, подтверждающий эффективность такого выбора. Однако сформулированные следствия могут иметь более широкое применение. Например, если время, затрачиваемое на итерации, является определяющим при вычислениях, то актуален анализ возможности ускорения за счет уменьшения затрат на матрично-векторные операции, являющиеся ядром методов крыловского типа. Одну из таких возможностей дает аппроксимация исходной матрицы теплицевой в ходе итерационного решения.

Специфика конкретной задачи, несомненно, влияет на результаты вычислительного эксперимента, и её учет может быть полезен. Так, сильно влиять на решение может характер и уровень изменения элементов матрицы СЛАУ. В рассмотренной задаче менялись значения элементов лишь в нижней части диагонали, причем эти изменения были одинаковы для каждого элемента и очень малы для каждой новой матрицы. Но такие изменения могут быть неодинаковыми и много большими (например, при изменении не одного, а нескольких параметров анализируемой структуры и в более широком диапазоне), что приведет к росту числа итераций при решении следующей СЛАУ. Между тем, этот рост можно использовать для обновления матрицы предобусловливателя при совершенствовании исходного алгоритма, что позволит уменьшать число итераций, адаптивно отслеживая изменения матрицы СЛАУ. Отметим, что это резко расширит сферу применения многократного решения СЛАУ итерационным методом в сравнении с методом, основанным на использовании блочного LU-разлоржения [2, 3]. Действительно, изменения матрицы теперь допускаются не только в нижнем правом блоке матрицы (что ограничивает, например, рассмотренную задачу изменением лишь относительной диэлектрической проницаемости), но и во всей матрице (что позволяет менять произвольное число любых параметров исследуемой структуры), причем эти изменения (при усовершенствовании алгоритма) могут быть значительными, а существенное ускорение сохранится. Можно ожидать, что это позволит существенно ускорить решение даже такой вычислительно затратной, но крайне важной на практике, задачи, как оптимизация по большому числу параметров в широком диапазоне их изменения.

Таким образом, результаты работы демонстрируют потенциально высокую эффективность использования итерационных методов с предобусловливанием для многократного решения СЛАУ с частично изменяющейся матрицей и возможность их применения для ускорения многократного решения СЛАУ с полностью изменяющейся матрицей.

Авторы благодарны Л. Ю. Колотилиной за ценные замечания по статье.

Литература

1. С. П. Куксенко, Т. Р. Газизов, *Совершенствование алгоритма вычисления методом моментов ёмкостных матриц структуры проводников и диэлектриков в диапазоне значений диэлектрической проницаемости.* — Электромагн. волны электронн. сист. No. 10 (2012), 13–21.
2. Р. С. Суровцев, В. К. Салов, *Исследование ускорения многократного решения СЛАУ с частично изменяющейся матрицей что блочным методом.* – Электромагн. волны электронн. сист. No. 10 (2012), 22–24.
3. Р. С. Суровцев, С. П. Куксенко, *Вычисление матрицы емкостей произвольной системы проводников и диэлектриков методом моментов: зависимость ускорения за счет блочного LU-разложения от порядка матрицы СЛАУ.* — Известия высших учебных заведений. Физика **55** (2012), No. 9/3, 126–130.
4. *Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ No. 2012660373. TALGAT 2011.* Авторы: Газизов Т. Р., Мелкозеров А. О., Газизов Т. Т., Куксенко С. П., Заболоцкий А. М., Аширбакиев Р. И., Лежнин Ег. В., Салов В. К., Лежнин Ев. В., Орлов П. Е., Калимулин И. Ф., Суровцев Р. С., Комнатнов М. Е. Заявка No. 2012618426. Дата поступления 5 октября 2012 г. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 16 ноября 2012 г.
5. Т. Р. Газизов, С. П. Куксенко, *Оптимизация допуска обнуления при решении СЛАУ итерационными методами с предобусловливанием в задачах вычислительной электродинамики.* — Электромагн. волны электронн. сист. **8** (2004), 26–28.
6. С. П. Куксенко, Т. Р. Газизов, *Итерационные методы решения системы линейных алгебраических уравнений с плотной матрицей.* Томский государственный университет, Томск, 2007.
7. H. van der Vorst, *Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for solution of nonsymmetric linear systems.* — SIAM J. Sci. Stat. Comput. **13** (1992), 631–644.
8. S. P. Kuksenko, T. B. Gazizov, *Dense linear system solution by preconditioned iterative methods in computational electromagnetics.* In: 19th International Zurich Symposium of Electromagnetic Compatibility (2008), pp. 918–921.

Akhunov R. R., Kuksenko S. P., Salov V. K., Gazizov T. R. Multiple iterative solution of linear algebraic systems with a partially varying matrix.

An iterative algorithm for solving a series of linear algebraic systems with a partially varying coefficient matrix is suggested. Simple formulas for evaluating the speed up obtained are derived and used in choosing the related parameters. As examples, the choice of the drop tolerance and of the initial guess are considered. Multiple solution of linear systems of orders 708, 1416, 3540, and 4425 arising in computing (by the method of moments) the electric capacity of two stripes on a dielectric layer above a perfect conductive plane in the range of dielectric permeability is analyzed.

As compared with the Gauss method, a 49 times speed up in solving 1000 linear systems of order 4425 is achieved.

Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники,
кафедра телевидения и управления,
пр. Ленина, 40, г. Томск 634050, Россия

E-mail: arr@pop3.ru

E-mail: ksergp@sibmail.com

E-mail: catred@mail2000.ru

E-mail: talgat@tu.tusur.ru

Поступило 2 апреля 2013 г.