Журнал обчислювальної та прикладної математики | 2014, №1(115) | Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 519.852:519.876

ВИКОРИСТАННЯ ПЕРЕДОБУМОВЛЮВАЧІВ НА ОСНОВІ МЕТОДУ БАЗИСНИХ МАТРИЦЬ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ ТЕОРІЇ ПРУЖНОСТІ

В. О. Богаєнко, В. І. Кудін

Резюме. Розглядаються передобумовлювачі, побудовані з використанням методики неповного розкладу на основі алгоритмів методу базисних матриць. Приводяться результати їх застосування при розв'язанні систем лінійних алгебраїчних рівнянь, зокрема таких, що виникають при дискретизації методом скінченних елементів деяких задач розрахунку напружено-деформованого стану ґрунтів.

Вступ

Матричні обчислення, зокрема, задача розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР), виникають при математичному моделюванні більшості фізичних процесів. В багатьох випадках, це СЛАР з погано обумовленими розрідженими квадратними матрицями обмежень, що мають великий розмір. В таких ситуаціях найчастіше застосовними є ітераційні методи розв'язання СЛАР, зокрема такі як метод спряжених градієнтів (CG) чи стабілізований метод біспряжених градієнтів (BiCGstab) [2].

Основною методикою покращення швидкості збіжності та точності отримуваних розв'язків при розв'язанні погано обумовлених СЛАР ітераційними методами є використання передобумовлювачів [5] — матриць, домноження яких на розв'язувану СЛАР призводить до зменшення числа обумовленості її матриці обмежень. Оскільки ідеальним передобумовлювачем є обернена матриця, більшість передобумовлювачів будують як наближення до неї. Найбільш розповсюдженими методиками їх побудови є неповний розклад матриць (наприклад, неповний LU розклад) та неповне обернення (зокрема, поліноміальні передобумовлювачі). Серед інших варто виділити багатосіткові та вейвлетні передобумовлювачі.

Зауважимо, що ефективність передобумовлювачів в переважній більшості випадків неможливо довести теоретично, тож задачею є, зокрема, експериментальне визначення класів матриць, щодо яких конкретний передобумовлювач є ефективним з позиції пришвидшення розрахунків чи отримання більш точного розв'язку.

Алгоритми неповного методу базисних матриць

Однією з методик побудови передобумовлювачів для ітераційних методів розв'язання розріджених СЛАР є методика неповного розкладу, що полягає у обмежені множини елементів матриці, що змінюються в процесі побудови її розкладу, наприклад LU [2] чи QR [5] або при застосуванні процедури обернення, наприклад методу Грамма-Шмідта [4]. Таким чином отримується матриця, наближена до оберненої, яка може використовуватись як передобумовлювач.

Така методика застосовна й до алгоритмів методу базисних матриць [1].

Будемо розглядати СЛАР

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

де $\dim A = [n, n]$, $\dim x = \dim b = [n, 1]$.

Алгоритм методу базисних матриць, результатом якого є матриця A^{-1}, обернена до A, запишемо так:

Нехай $A_1^{(i)}$ *— базисна матриця на* i*-тій ітерації алгоритму,* $\dim A_1^{(i)} = [n, n]$, $A_1^{(i)}[j]$ *— стовпець матриці* $A_1^{(i)}$, a_i *— рядок матриці* A, $A_1^{(0)} = A_1^0$.

Тоді i*-та ітерація алгоритму має такий вигляд:*

1) $v = diag\left(AA_1^{(i-1)}\right)$;

2) $k = \max_i |v_i|$;

3) $\alpha = a_k A_1^{(i-1)}$;

4) $A_1^{(i)}[k] = A_1^{(i-1)}[k]/\alpha_k$;

5) $A_1^{(i)}[l] = A_1^{(i-1)}[l] - \alpha_l A_1^{(i)}[k],\ l \neq k$.

Після проведення n ітерацій $A_1^{(n)} = A^{-1}$.

Розглянемо сімейство алгоритмів неповного розкладу, побудоване на базі вищеописаного алгоритму методу базисних матриць.

Перепишемо пункт 5, ввівши обмеження на індекси елементів матриці, щодо яких будуть здійснюватись перетворення:

$$A_1^{(i)}[l]_j = A_1^{(i-1)}[l]_j - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j,\ l \neq k,\ (l, j) \in R, \tag{2}$$

де R — множина індексів елементів матриці.

За аналогією з алгоритмами неповного LU-розкладу [3], вибираючи конкретну множину R, будемо розглядати три алгоритми неповного методу базисних матриць:

— IBMM0, якщо R — множина ненульових елементів матриці A;

— IBMM1, якщо R — множина ненульових елементів матриці AA^T;

— IBMMd, якщо множина R змінюється динамічно в процесі обчислень.

Динамічна зміна множини R у алгоритмі IBMMd відбувається таким чином, щоб на кожному кроці для неї виконувалась

Умова 1. Кількість елементів (l, j) множини R не повинно перевищувати кількість ненульових елементів у l-тому рядку матриці A.

Для виконання цієї умови пункт 5 базового алгоритму змінюється таким чином:

якщо $(l, j) \in R$, *або* $(l, j) \notin R$, *але умова 1 виконується для стовпця* l, *то* $A_1^{(i)}[l]_j = A_1^{(i-1)}[l]_j - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j,\ l \neq k,\ R = R \cup (l, j)$, *тобто елемент змінюється й додається до множини, якщо він там не присутній;*

якщо $(l, j) \notin R$ *й умова 1 не виконується, то, якщо* $\exists m$: $\left|A_1^{(i-1)}[l]_m\right| < \left|A_1^{(i-1)}[l]_j - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j\right|$, *проводиться перетворення* $A_1^{(i-1)}[l]_m = 0,\ A_1^{(i)}[l]_j = A_1^{(i-1)}[l]_j - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j,\ R = (R - (l, m)) \cup (l, j)$, *тобто елемент змінюється й додається до множини, якщо у стовпці існує елемент з меншим за модулем значенням. Менший елемент при цьому обнуляється й видаляється з множини* R.

Механізм корекції у алгоритмах IBMM

На кожній ітерації методу базисних матриць виконується умова $a_k A_1^{(i)}[l] = \begin{cases} 1, & l = k \\ 0, & l \neq k \end{cases}$, виконання якої порушується при неповних перетвореннях. Пропонується алгоритм корекції, який забезпечує виконання цієї умови у неповному методі базисних матриць.

Для алгоритмів IBMM0 та IBMM1 додається такий крок алгоритму:

6) якщо $(l, j) \notin R$ *і* $a_{kj} \neq 0$, $\exists m = \max\limits_j |a_{kj}|$, *і* $A_1^{(i-1)}[l]_j \neq 0$, *то* $A_1^{(i)}[l]_m = A_1^{(i)}[l]_m - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j a_{kj}/a_{km}$.

У випадку алгоритму IBMMd, крок 6 застосовується тоді, коли $(l, j) \notin R$, умова 1 не виконується й елемент з меншим за модулем значенням у стовпці не існує, або коли проводиться заміщення ненульового елементу:

6а) якщо $(l, j) \notin R$, *умова 1 не виконується й* $\neg\exists m : \left|A_1^{(i-1)}[l]_m\right| < \left|A_1^{(i-1)}[l]_j - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j\right|$, *якщо* $\exists m = \max\limits_j |a_{kj}|, A_1^{(i-1)}[l]_j \neq 0$, *то* $A_1^{(i)}[l]_m = A_1^{(i)}[l]_m - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j a_{kj}/a_{km}$;

6б) якщо $(l, j) \notin R$, *умова 1 не виконується й* $\exists m : \left|A_1^{(i-1)}[l]_m\right| < \left|A_1^{(i-1)}[l]_j - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_j\right|$, *та* $\exists p = \max\limits_j |a_{kj}|, A_1^{(i-1)}[l]_j \neq 0,\ j \neq m$, *то* $A_1^{(i)}[l]_p = A_1^{(i)}[l]_p - \alpha_l A_1^{(i)}[k]_m a_{km}/a_{kp}$.

Алгоритми з механізмом корекції будемо називати IBMM0+c, IBMM1+c, IBMMd+c.

Поєднання алгоритмів IBMM з передобумовлювачем Якобі

Враховуючи ефективність передобумовлювача Якобі при розв'язанні багатьох СЛАР, він може бути поєднаний з алгоритмами неповного методу базисних матриць. В такому випадку лівий передобумовлювач матиме вигляд $\left[diag A_1^{(n)} A\right]^{-1} A_1^{(n)}$. Такі алгоритми будемо позначати як "+rs".

До алгоритмів неповного методу базисних матриць може бути також застосована процедура уточнення [6], яка полягає у повторному виконанні алгоритму, беручи $A_1^{(0)} = A_1^{(n)}$.

Тестування ефективності алгоритмів.

Ефективність матриць, генерованих розробленими алгоритмами, в якості лівих передобумовлювачів, тестувалась на матрицях з Tim Davis Matrix Collection, розв'язуючи задачі щодо них алгоритмом Bicgstab. Окремим предметом аналізу було застосування розроблених алгоритмів до СЛАР, що виникають при дискретизації методом скінченних елементів стаціонарних задач теорії пружності.

Будемо розглядати двовимірну задачу розрахунку напруженодеформованого стану основи ґрунтової дамби.

Нехай $\vec{w} = (u, v)$ — вектор зміщень ґрунту, μ, λ — коефіцієнти Ляме, g — прискорення вільного падіння, $\vec{\sigma} = (\lambda(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}) + 2\mu\frac{\partial u}{\partial x}, \lambda(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}) + 2\mu\frac{\partial v}{\partial y})$, $\tau_{xy} = \mu(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x})$ — складові тензора напруг, H — напір, ρ — щільність ґрунту.

У прямокутній області $\Omega = \{x \in [0, l], y \in [0, m]\}$ розглядались дві системи рівнянь:

$$(\frac{\partial}{\partial x}\sigma_x + \frac{\partial}{\partial y}\tau_{xy}) = 0, \tag{3}$$

$$(\frac{\partial}{\partial y}\sigma_y + \frac{\partial}{\partial x}\tau_{xy}) = -\rho g \tag{4}$$

та

$$(\frac{\partial}{\partial x}\sigma_x + \frac{\partial}{\partial y}\tau_{xy}) - \rho g\frac{\partial}{\partial x}H = 0, \tag{5}$$

$$(\frac{\partial}{\partial y}\sigma_y + \frac{\partial}{\partial x}\tau_{xy}) - \rho g\frac{\partial}{\partial y}H = -\rho g, \tag{6}$$

$$k(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y})\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2}\right) = 0. \tag{7}$$

Ставились крайові умови:

$$\vec{w} = (0, 0),\ \frac{\partial H}{\partial y} = 0, y = m, \tag{8}$$

$$u = 0,\ \frac{\partial H}{\partial x} = 0, x = 0,\ x = l. \tag{9}$$

Для системи (3)–(4) на ділянці границі області $y = 0$ ставилась умова $\sigma_y = f(x),\ \tau_{xy} = 0$, а для системи (5)–(7) — $\sigma_y = f_1(x),\ \tau_{xy} = 0,\ H = f_2(x)$, де $f(x)$, $f_1(x)$, $f_2(x)$ — задані функції.

Розв'язуючи тестову задачу, СЛАР, що виникає при розв'язанні методом скінченних елементів задачі (3)–(4), будемо позначати як SD, а СЛАР, що виникає при роз'вязанні системи (5)–(7) — як SD2. Матриця SD має розмір $\sim$11000x11000 та кількість ненульових елементів $\sim 4*10^5$, коефіцієнт наповненості — $\sim$36. Матриця SD2 має розмір $\sim$17000x17000 та кількість ненульових елементів $\sim 6*10^5$, коефіцієнт наповненості — $\sim$35.

Шаблон розрідженості матриці SD2 зображено на рис.1, а передобумовлювачів, згенерованих алгоритмами IBMM0, IBMM1 та IBMMd — на рис. 2–4. Відтінками сірого тут позначені ненульові елементи, яскравість яких визначалась як нормалізоване значення елементу матриці.

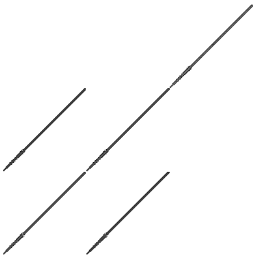

Рис.1 Шаблон розрідженості матриці SD2

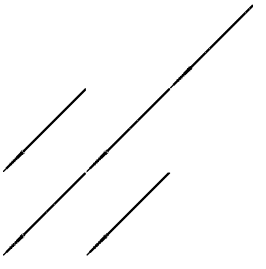

Рис.2 Шаблон розрідженості передобумовлювача, побудованого алгоритмом IBMM0

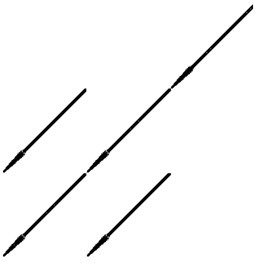

Рис.3 Шаблон розрідженості передобумовлювача, побудованого алгоритмом IBMM1

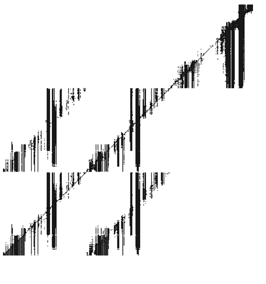

Рис.4 Шаблон розрідженості передобумовлювача, побудованого алгоритмом IBMMd

У таблиці 1 наведені дані стосовно того, на якій ітерації роботи алгоритму Bicgstab досягалась відповідна точність розв'язання. Максимальна кількість ітерацій дорівнювала 1000. Всі елементи вектору b для матриць з Tim Davis Matrix Collection дорівнювали 1, $A_1^0 = I$.

Таблиця 1. Номер ітерації, на якій досягається відповідна нев'язка ε

			1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	Кількість ітерацій уточнення
			-	-	-	-	-	-	+	-	-	-	-	+	+	Механізм корекції
Матриця	-	+	-	-	-	+	+	+	-	-	-	+	+	-	+	Передобумовлювач Якобі
i $\log_{10}\varepsilon$	-	-	0	1	d	0	1	d	0	0	1	0	1	1	1	Передобумовлювач 0 – IBMM0 1 – IBMM1 d - IBMMd
bfwa62																
-2	26	20	57	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
-4	35	23	61	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
-6	37	31	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
-8	42	33	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
-10	44	34	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
bfwa398																
-2	72	54	269	-	226	313	-	195	-	-	-	-	-	-	-	
-4	103	78	295	-	230	317	-	213	-	-	-	-	-	-	-	
-6	107	87	304	-	266	317	-	245	-	-	-	-	-	-	-	
-8	108	89	-	-	286	-	-	281	-	-	-	-	-	-	-	
-10	118	90	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
epb0																
-4	-	918	-	-	-	663	-	-	-	490	-	490	-	-	-	
-6	-	992	-	-	-	675	-	-	-	526	-	518	-	-	-	
-8	-	-	-	-	-	772	-	-	-	548	-	528	-	-	-	
-10	-	-	-	-	-	815	-	-	-	585	-	567	-	-	-	
-12	-	-	-	-	-	838	-	-	-	588	-	575	-	-	-	
olm100																
-2	82	-	73	-	-	-	-	-	-	56	-	-	-	35	58	
-4	83	-	79	-	-	-	-	-	-	56	-	-	-	35	61	
-6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	35	61	
poli																
-6	17	17	8	6	-	8	7	-	-	8	8	8	10	-	-	
-10	20	20	9	9	-	9	9	-	-	9	9	9	12	-	-	
-14	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9	12	-	-	
SD																
3	123	109							100							
1	162	147							124							
-1	218	162							179							
SD2																
7	299	286	-	-	-	-	-	-	86	-	-	-	-	-	-	
5	524	499	-	-	-	-	-	-	155	-	-	-	-	-	-	
3	971	859	-	-	-	-	-	-	455	-	-	-	-	-	-	
1	-	-	-	-	-	-	-	-	811	-	-	-	-	-	-	

Логарифм нев'язки при розв'язанні СЛАР з матрицею epb0 в залежності від номера ітерації при використанні різних передобумовлювачів наведено на рис.5. Теж саме для матриць SD та SD2 наведено на рис.6 та 7.

У першому випадку спостерігається відсутність впливу передобумовлювачів на процес розв'язку до певної ітерації, після якої використання передобумовлювачів призводить до різкого зменшення нев'язки. Це може бути пояснене розподілом власних значень матриці — переважна більшість з них має значення у діапазоні від 10^{-2} до 10, але деяка кількість має суттєво менші значення порядку 10^{-6}.

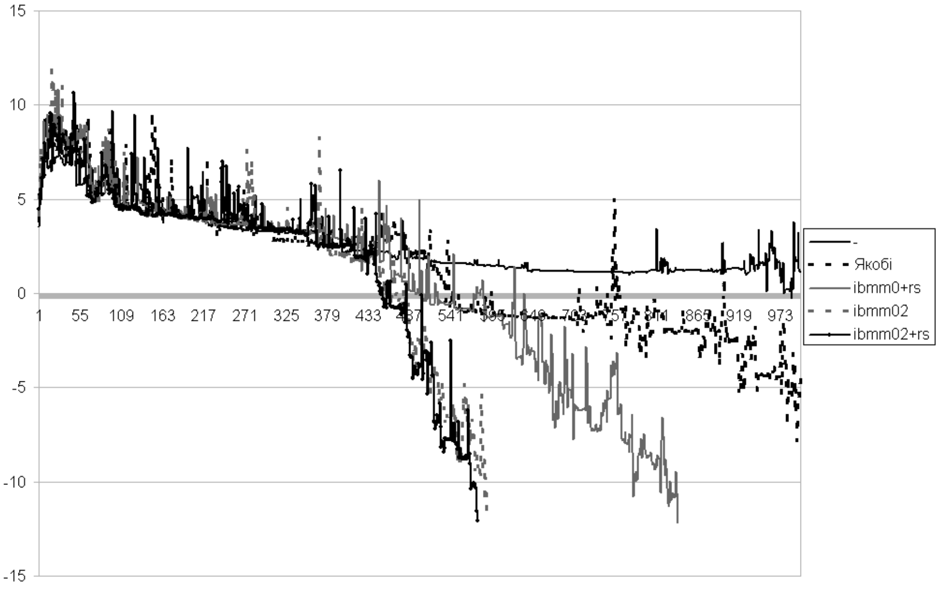

Рис.5 $\log_{10}\varepsilon$ при розв'язанні СЛАР з матрицею epb0 в залежності від номера ітерації

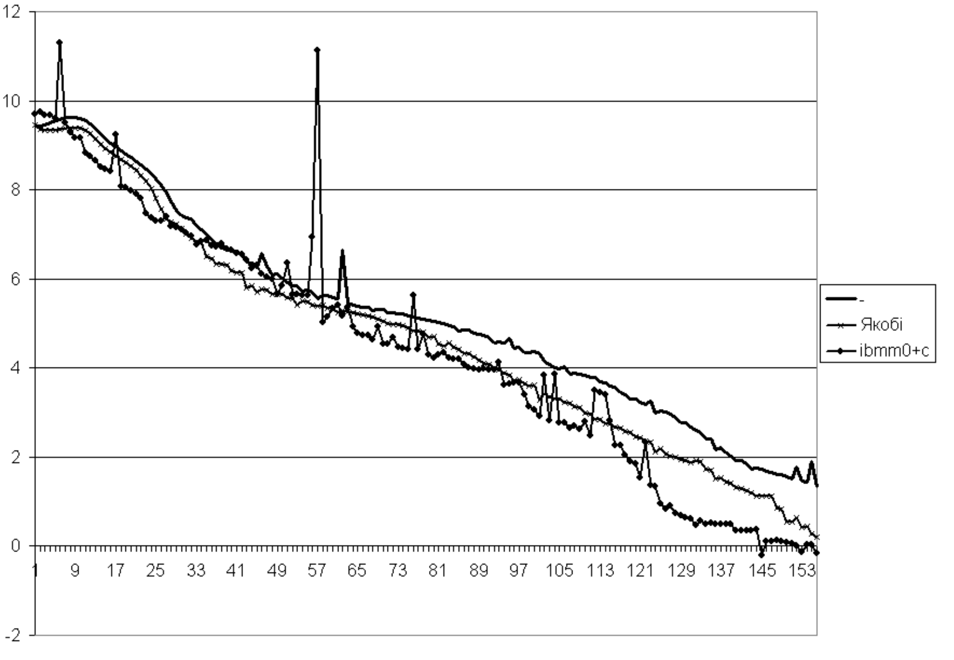

Рис.6 $\log_{10}\varepsilon$ при розв'язанні СЛАР з матрицею SD в залежності від номера ітерації

У другому випадку, через суттєво погану обумовленість матриці СЛАР, жодним з алгоритмів не вдалось отримати розв'язок достатньої точності. Проте використання передобумовлювача ibmm0+c дозволило ітераційному алгоритму швидше досягти мінімальної отриманої нев'язки. Зауважимо, що у випадку краще обумовленої й меншої за розміром матриці SD, ефективність від застосування передобумовлювача нижча.

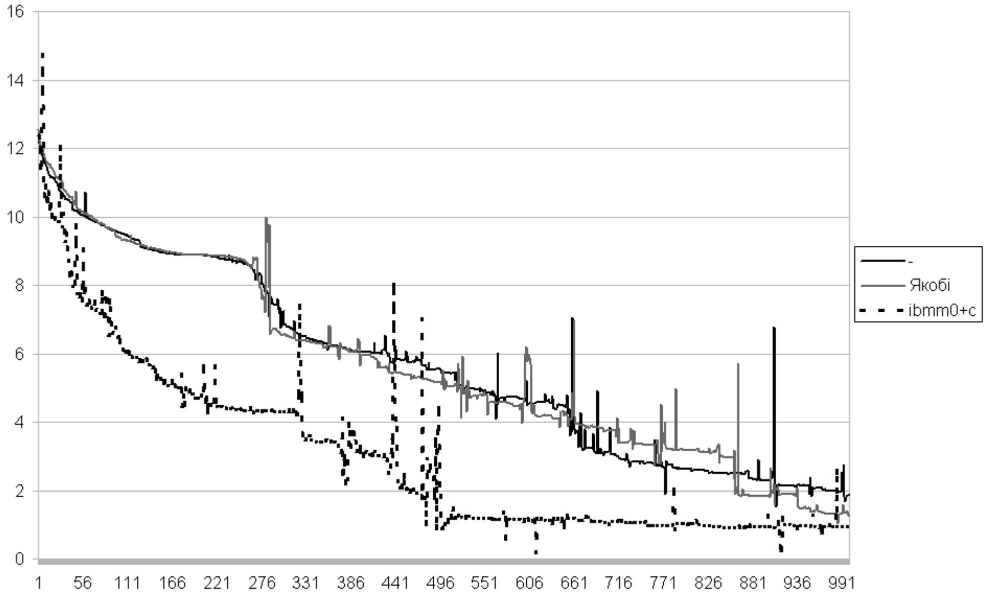

Рис.7 $\log_{10} \varepsilon$ при розв'язанні СЛАР з матрицею SD2 в залежності від номера ітерації

Висновки

Як показують результати обчислювальних експериментів, різні модифікації розроблених переобумовлювачів є ефективними при їх використанні з різними матрицями.

Проте варто відзначити, що, загалом, вони ефективніші при застосуванні до матриць з високим числом обумовленості, зокрема, при застосуванні до порівняно погано обумовлених матриць olm100 та epb0 вдалось на декілька порядків підвищити точність розв'язання. З іншої сторони, при застосуванні до порівняно добре обумовлених матриць bfwa62, bfwa398 позитивних ефектів не спостерігалось.

У випадку застосування передобумовлювача ibmm0+c до СЛАР, отриманих в результаті дискретизації методом скінченних елементів стаціонарних задач теорії пружності, спостерігалось збільшення швидкості збіжності ітераційних методів розв'язання СЛАР. Як й у випадку з іншими матрицями, позитивний ефект був більший при застосуванні до матриць з більшим числом обумовленості.

Література

1. Кудін В. І., Ляшко С. І., Яценко Ю. П., Хритоненко Н. В. Метод штучних базисних матриць // Доповіді НАН України. — 2007. — №9. — С. 30–34.
2. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems, 2 edition — Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003. — 528 p.
3. Y. Saad ILUT: a dual threshold incomplete LU factorization // Numer. Linear Algebra Appl. — 1994. — 1(4). — P. 387–402.
4. Liu Q., Zhang F. Incomplete hyperbolic Gram-Schmidt-based preconditioners for the solution of large indefinite least squares problems // Journal of Computational and Applied Mathematics, 250. — 2013. — P. 210–216.
5. Chen K. Matrix Preconditioning Techniques and Applications — Cambridge University Press, 2005. — 592 p.
6. Богаенко В. А., Кудин В. И., Скопецкий В. В. Анализ вычислительных схем моделирования процессов геогидродинамики // Проблемы управления и информатики. — 2009, — №8. — С. 1–12.

Інститут Кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, вул. Глушкова, 40, Київ, 03680, Україна.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, Київ, 01601, Україна.

Надійшла 15.12.2013