НЕПОЛНАЯ СТОЛБЦОВО-СТРОЧНАЯ ФАКТОРИЗАЦИЯ НЕСИММЕТРИЧНЫХ МАТРИЦ

Саух С.Е.
Институт проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова НАН Украины

Запропонований метод неповної стовпцево-рядкової факторизації матриць. Метод не вимагає перестановок рядків і стовпців в субматрицях. Обчислювальна стійкість методу забезпечується таким вибором провідних елементів в субматрицях, при якому на кожному кроці факторизації досягається мінімум відхилень по нормі Фробеніуса між перетворюваними і одержуваними субматрицями. Значущість елементів факторних матриць визначається шляхом порівняння відповідних норм рядків і стовпців перетворюваних субматриць і субматриць, що віднімаються. Новий метод використовує менші об'єми пам'яті, в порівнянні з методами факторизації AINV, ILUC і RIF-Ns.

Введение

Для формирования предобусловливателей предложен метод неполной столбцово-строчной (*ICR*–) факторизации несимметричных матриц. Метод не требует перестановок строк и столбцов в субматрицах. Поэтому получаемые факторные матрицы не являются треугольными. Вычислительная устойчивость метода обеспечивается применением оригинальной процедуры поиска ведущих элементов в субматрицах. Поиск выполняется в ограниченном множестве строк с наименьшим количеством ненулевых элементов. Выбор ведущего элемента осуществляется по критерию минимума произведения частичных норм фактор-строки и фактор-столбца, не содержащих самого элемента. Такой выбор ведущего элемента на текущем шаге факторизации позволяет минимизировать расхождение по норме Фробениуса между преобразуемой и преобразованной субматрицами, что обеспечивает устойчивость вычислений для плохо обусловленных матриц. В методе *ICR*–факторизации применена оригинальная оценка малозначимости элементов факторных матриц, основанная на сопоставлении норм строк и столбцов преобразуемых и вычитаемых субматриц. Поскольку каждая вычитаемая субматрица представляется произведением фактор-строки и фактор-столбца, то такое сопоставление норм позволяет ввести обобщенную оценку значимости элементов образуемых факторных матриц и интерпретировать принебрегаемые элементы как ошибки конечноразрядных вычислений. Преимущества предложеного метода

ICR–факторизации над методом *ILU*–факторизации и его модификациями иллюстрируются примерами решения тестовых систем уравнений с использованием итерационного метода проекций решений на подпространства Крылова GMRES(m).

Метод $CR-$ факторизации матриц

Основой метода *CR*–факторизации [1] является последовательность действий, выполняемых над заданой $n \times n$ матрицей $\boldsymbol{A}$ в соответствии с формулами

$$\begin{gathered}
\boldsymbol{A}_{(-i_1,-j_1)} = \boldsymbol{A} - \boldsymbol{C}_{j_1} \cdot \boldsymbol{R}_{i_1}, \\
\boldsymbol{A}_{(-i_1,-j_1)}(i_1,:) = 0, \ \boldsymbol{A}_{(-i_1,-j_1)}(:,j_1) = 0, \\
i_1 \in \{1, 2, \ldots, n\}, \\
j_1 \in \{1, 2, \ldots, n\}; \\
\boldsymbol{A}_{(-i_2,-j_2)} = \boldsymbol{A}_{(-i_1,-j_1)} - \boldsymbol{C}_{j_2} \cdot \boldsymbol{R}_{i_2}, \\
\boldsymbol{A}_{(-i_2,-j_2)}(i_2,:) = 0, \ \boldsymbol{A}_{(-i_2,-j_2)}(:,j_2) = 0, \\
i_2 \in \{1, 2, \ldots, n\} \cap i_2 \neq i_1, \\
j_2 \in \{1, 2, \ldots, n\} \cap j_2 \neq j_1; \\
\vdots \\
\boldsymbol{A}_{(-i_n,-j_n)} = \boldsymbol{A}_{(-i_{n-1},-j_{n-1})} - \boldsymbol{C}_{j_n} \cdot \boldsymbol{R}_{i_n} = 0, \\
i_n \in \{1, 2, \ldots, n\} \cap i_n \notin \{ i_k | \, k = 1, 2, \ldots, n-1 \}, \\
j_n \in \{1, 2, \ldots, n\} \cap j_n \notin \{ j_k | \, k = 1, 2, \ldots, n-1 \}.
\end{gathered} \tag{1}$$

Например, в результате разложения 6×6 матрицы $\boldsymbol{A}$ относительно второй строки $i_1 = 2$ и четвертого столбца $j_1 = 4$, имеем

$$\boldsymbol{A}_{(-2,-4)} = \boldsymbol{A} - \boldsymbol{C}_4 \cdot \boldsymbol{R}_2 = = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} c_{14} \\ c_{24} \\ c_{34} \\ c_{44} \\ c_{54} \\ c_{64} \end{vmatrix} \times$$

$$\times \begin{vmatrix} r_{21} & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} & r_{26} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \times & \times & \times & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & \times & \times & 0 & \times & \times \\ \times & \times & \times & 0 & \times & \times \\ \times & \times & \times & 0 & \times & \times \\ \times & \times & \times & 0 & \times & \times \end{vmatrix},$$

где элементы $\{ c_{i4} | i = 1,2,\ldots,6 \}$ и $\{ r_{2j} | j = 1,2,\ldots,6 \}$ столбца $\boldsymbol{C}_4$ и строки $\boldsymbol{R}_2$ легко определяются по соответствующим элементам исходной матрицы $\boldsymbol{A}$, причем, элементы c_{24} и r_{24}, удовлетворяющие равенству $c_{24} \cdot r_{24} = a_{24}$, находятся в предположении, что либо $c_{24} = 1$ и $r_{24} = a_{24}$, либо $r_{24} = 1$ и $c_{24} = a_{24}$.

Поскольку в формируемых матрицах $\boldsymbol{A}_{(-i_k,-j_k)}$ столбцы j_k и строки i_k становятся нулевыми, то итоговая матрица будет $\boldsymbol{A}_{(-i_n,-j_n)} \equiv 0$. Из соотношений (1) следует равенство

$$\boldsymbol{A} = \sum_{k=1}^{n} \boldsymbol{C}_{j_k} \boldsymbol{R}_{i_k} = \boldsymbol{CR} \qquad (2)$$

где матрицы $\boldsymbol{C}$ и $\boldsymbol{R}$ состоят из столбцов $\{\boldsymbol{C}_{j_k} | j_k = 1,2,\ldots,n\}$ и строк $\{\boldsymbol{R}_{i_k} | i_k = 1,2,\ldots,n\}$ соответственно.

Соотношения (1) являются обобщением известных формул факторизации. Установив значения индексов разложения $i_k = k$ и $j_k = k$, приходим к формулам LU-факторизации, определяющим нижне- и верхнетреугольную факторные матрицы $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{C}$ и $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{R}$. Если же в соотношения (1) – (2) ввести групповые индексы $\{i_k\}$ и $\{j_k\}$, а также соответствующие им блочные строки $\left|\{\boldsymbol{R}_{i_k}\}\right|^T$ и столбцы $\left|\{\boldsymbol{C}_{j_k}\}\right|$, то получим формулы обобщенной блочной факторизации. В частности, установив значения групповых индексов $\{i_k\} = \{k, n-k+1\}$ и $\{j_k\} = \{k, n-k+1\}$, получим формулы QI-факторизации [2], которые определяют блочные строки $|\boldsymbol{R}_k, \boldsymbol{R}_{n-k+1}|^T$ и столбцы $|\boldsymbol{C}_k, \boldsymbol{C}_{n-k+1}|$. Введение в (1) – (2) групповых индексов переменной структуры $\boldsymbol{var}\{i_k\}$ и $\boldsymbol{var}\{j_k\}$, позволяет определить метод факторизации не только с фиксированными, но и с переменными размерами блочных строк $\left|\boldsymbol{var}\{\boldsymbol{R}_{i_k}\}\right|^T$ и столбцов $\left|\boldsymbol{var}\{\boldsymbol{C}_{j_k}\}\right|$.

Основное преимущество метода CR-факторизации над существующими методами заключается в адаптивности соотношений (1) – (2) к позиционированию выбираемых ведущих элементов. Заметим, что использование специальных схем хранения разреженных матриц сопряжено с необходимостью выполнения множества неарифметических операций для получения доступа к матричным элементам. Поэтому отсутствие в методе CR-факторизации перестановок строк и столбцов приводит к существенному сокращению объема вычислений, в среднем на треть [1].

Однако, применение метода CR-факторизации, как и других методов разложения разреженных матриц на множители, сопровождается непредсказуемым увеличением количества ненулевых элементов в факторных матрицах $\boldsymbol{C}$ и $\boldsymbol{R}$ относительно их количества в исходной матрице $\boldsymbol{A}$. В условиях жестких ограничений вычислительных ресурсов непредсказуемые требования к объемам памяти в ряде случаев не могут быть удовлетворены. Поэтому прибегают к методам неполной CR-факторизации (ICR-факторизации) матриц для построения предобусловливателей $\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{A}} + \boldsymbol{\Delta} = \tilde{\boldsymbol{C}}\tilde{\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{\Delta}$ с ошибкой $\boldsymbol{\Delta}$. Факторизованные матрицы-предобусловлеватели $\tilde{\boldsymbol{A}}$

используются в итерационных методах проекций решений на подпространства Крылова для ускорения сходимости последовательности решений к точному решению систем алгебраических уравнений вида $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{B}$ [3]. Особенности построения метода $ICR-$факторизации матриц и обсуждение результатов его тестирования рассматриваются ниже.

Особенности методов неполной факторизации матриц

Существующие методы неполной факторизации матриц основаны на различных подходах к отбрасыванию части ненулевых элементов факторных матриц [3-5].

Наиболее легко реализуемым является подход, который состоит в сохранении шаблона $P\langle\boldsymbol{A}\rangle$ размещения ненулевых элементов исходной матрицы $\boldsymbol{A}$ в шаблонах $P\langle\tilde{\boldsymbol{C}}\rangle$ и $P\langle\tilde{\boldsymbol{R}}\rangle$ размещения наиболее значимых элементов матриц $\tilde{\boldsymbol{C}}$ и $\tilde{\boldsymbol{R}}$ [3]. При таком подходе соблюдаются три условия:

$$P\langle\tilde{\boldsymbol{C}}\rangle\subset P\langle\boldsymbol{A}\rangle \text{ и } P\langle\tilde{\boldsymbol{R}}\rangle\subset P\langle\boldsymbol{A}\rangle;$$
$$\forall(i,j)\in P\langle\boldsymbol{A}\rangle:\ \left[\tilde{\boldsymbol{C}}\tilde{\boldsymbol{R}}\right]_{ij}=[\boldsymbol{A}]_{ij};$$
$$P\langle\boldsymbol{A}\rangle\cap P\langle\boldsymbol{\Delta}\rangle=0.$$

Введенное для случая $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{C}$ и $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{R}$ приближенное представление $\boldsymbol{A}\approx\tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{U}}$ является неполной $LU-$факторизацией матрицы $\boldsymbol{A}$ или $ILU(0)-$факторизацией с нулевым заполнением. Если допускается расширение шаблона $P\langle\tilde{\boldsymbol{L}}+\tilde{\boldsymbol{U}}\rangle$ относительно шаблона $P\langle\boldsymbol{A}\rangle$ в результате учета p дополнительных ненулевых элементов в каждой строке матрицы $\tilde{\boldsymbol{U}}$ и в каждом столбце матрицы $\tilde{\boldsymbol{L}}$, то в этом случае выполняется $ILU(p)-$факторизация. Достоинством $ILU(p)-$факторизации, где $p\geq 0$, является предсказуемость требований к объемам памяти, необходимой для размещения факторных матриц. Однако, безконтрольное проникновение ошибок в матрицы $\tilde{\boldsymbol{L}}$ и $\tilde{\boldsymbol{U}}$ снижает аппроксимационные свойства матрицы-предобусловливатя $\tilde{\boldsymbol{A}}=\tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{U}}$, особенно в случаях плохой обусловленности исходной матрицы $\boldsymbol{A}$. Поэтому $ILU(p)-$факторизация используется в алгоритмах решения систем уравнений не имеющих особенностей.

Более сложным в реализации является подход, основанный на различных оценках значимости ненулевых элементов факторных матриц $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{U}$, что позволяет ограничить влияние отбрасываемых элементов на проникновение ошибок в матрицу-предобусловливатель вида $\tilde{\boldsymbol{A}} = \tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{U}}$.

В современных методах неполной LU – факторизации таких, как $ILUT$ [3], $ILUC$ [4], $AINV$ [6], $RIF-Ns$ [5], построение предобусловливателей основано на разложении вида $\tilde{\boldsymbol{A}} = \tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{D}\tilde{\boldsymbol{U}}$ содержащем диагональную матрицу $\boldsymbol{D}$. Процесс факторизации сопровождается принебрежением теми ненулевыми элементами l_{jk} матрицы $\boldsymbol{L}$ и u_{kj} матрицы $\boldsymbol{U}$, чьи значения удовлетворяют условиям

$$\left|l_{jk}\right|\left\|e_k^T \boldsymbol{L}^{-1}\right\| \le \tau, \qquad \left|u_{kj}\right|\left\|\boldsymbol{U}^{-1} e_k\right\| \le \tau, \tag{3}$$

где $\tau -$ априори задаваемый приемлемый уровень потерь, $e_k -$ вектор с единичным $k -$ м елементом. Выполняемая при все меньших значениях τ $ILU(\tau)-$ факторизация матрицы $\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{D}\tilde{\boldsymbol{U}} + \boldsymbol{\Delta}$ позволяет уменьшить ошибку $\boldsymbol{\Delta}$ до приемлемого уровня, а в предельном случае $\tau = 0$ получить $\boldsymbol{\Delta} = \boldsymbol{0}$, то есть выполнить факторизацию в полном объеме. Однако при таком способе регулирования ошибки $\boldsymbol{\Delta}$ наблюдается существенный рост ненулевых элементов в матрицах $\tilde{\boldsymbol{L}}$ и $\tilde{\boldsymbol{U}}$, а шаблон $P\left\langle \tilde{\boldsymbol{L}} + \tilde{\boldsymbol{U}} \right\rangle$ становится отличным от шаблона $P\langle \boldsymbol{A} \rangle$. Поэтому $ILU(\tau)-$ факторизация, как правило, дополняется условием ограничивающм заполненость матриц $\tilde{\boldsymbol{L}}$ и $\tilde{\boldsymbol{U}}$ ненулевыми элементами в количестве $nz\left(\tilde{\boldsymbol{L}} + \tilde{\boldsymbol{U}}\right)$ таком, что

$$\frac{nz\left(\tilde{\boldsymbol{L}} + \tilde{\boldsymbol{U}}\right)}{nz(\boldsymbol{A})} \le \gamma. \tag{4}$$

Априори задаваемое значение параметра γ фактически устанавливает границы заполнености факторных матриц ненулевыми элементами наибольшими среди тех, что не удовлетворяют условию (3). Таким образом выполняемая $ILU(\tau,\gamma)-$ факторизация обеспечивает возможность построения предобусловливателя $\tilde{\boldsymbol{A}} = \tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{D}\tilde{\boldsymbol{U}}$ матрицы $\boldsymbol{A}$ с хорошими аппроксимационными свойствами, что ускоряет сходимость итерационных методов проекций решений на подпространства Крылова [3-5].

Основная трудность реализации методов $ILU(\tau,\gamma)-$ факторизации заключается в оценке матричных норм $\left\|e_k^T \boldsymbol{L}^{-1}\right\|$ и $\left\|\boldsymbol{U}^{-1} e_k\right\|$ входящих в условия (3). Из последовательно формируемых столбцов и строк матриц $\tilde{\boldsymbol{L}}$ и $\tilde{\boldsymbol{U}}$ непосредственно получить такую оценку не представляется возможным. Поэтому $ILU(\tau,\gamma)-$ факторизация матрицы $\tilde{\boldsymbol{A}} = \tilde{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{D}\tilde{\boldsymbol{U}}$ совмещается с $AINV(\tau,\gamma)-$ факторизацией обратной матрицы $\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{W}$, выполняемой в неполном виде $\tilde{\boldsymbol{A}}^{-1} = \tilde{\boldsymbol{Z}}\boldsymbol{D}^{-1}\tilde{\boldsymbol{W}}$, где $\boldsymbol{Z}$ и $\boldsymbol{W}$ верхне- и нижнетреугольная матрицы, а $\tilde{\boldsymbol{Z}}$ и $\tilde{\boldsymbol{W}}$ – аппроксимирующие их матрицы [6]. Алгоритмы совместной $ILU(\tau,\gamma)-$ и $AINV(\tau,\gamma)-$

факторизации требуют дополнительных ресурсов оперативной памяти для размещения матриц $\tilde{Z}$ и $\tilde{W}$ одновременно с матрицами $\tilde{L}$ и $\tilde{U}$. В наиболее рациональных алгоритмах осуществляется формирование и размещение в памяти одной из матриц $\tilde{Z}$ и $\tilde{W}$ [4, 6]. Однако требование дополнительных ресурсов оперативной памяти является существенным недостатком подобных алгоритмов.

Кроме того алгоритмы неполной факторизации несимметричных матриц часто не могут обеспечить приемлемой аппроксимации факторных матриц в ограниченной оперативной памяти без предварительного упорядочения строк и столбцов исходной матрицы $\boldsymbol{A}$. Поскольку такое упорядочение не учитывает условий вычислительной устойчивости процесса факторизации, то неполная факторизация упорядоченных матриц осуществляется в условиях контроля за близостью ведущих элементов к машинному нулю. Те ведущие элементы, чьи значения не превышают машинный нуль, искусственно корректируются с тем, чтобы обеспечить устойчивость вычислительного процесса в ущерб его точности. Искусственная коррекция ведущих элементов вносит искажения в факторные матрицы, особенно существенные для плохо обусловленых матриц. Получаемые в результате предобусловливатели часто оказываются непригодными для для итерационного решения линейных систем алгебраических уравнений с особенностями.

Таким образом современные методы неполной факторизации матриц обладают двумя существенными недостатками – в них отсутствуют процедуры выбора ведущих элементов для обеспечения вычислительной устойчивости алгоритма и значительно завышены требования к использованию ресурсов оперативной памяти. Таких недостатоков лишен метод $ICR-$факторизации представленный ниже.

Устойчивость метода $CR-$ факторизации матриц

Анализ соотношений вида (1) показывает итерационный характер формул $CR-$факторизации матриц с числом итераций n. Поскольку речь идет о матрицах большой размерности, то такая цепь вычислений может приводить к существенному накоплению ошибок. Для обеспечения устойчивости вычислительного процесса следует на каждом шаге факторизации выбирать ведущий элемент так, чтобы минимизировать влияние произведения $\boldsymbol{C}_{j_k} \cdot \boldsymbol{R}_{i_k}$ на субматрицу $\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$, из которой образуется субматрица $\boldsymbol{A}_{(-i_k,-j_k)}$. Для этого поиск ведущего элемента $a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j_k)$ в субматрице $\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$ необходимо осуществлять в соответствии с требованием получения таких множителей $\boldsymbol{C}_{j_k}$ и $\boldsymbol{R}_{i_k}$, которые имеют минимально возможную норму

$$\begin{aligned}&\left\|\boldsymbol{A}_{(-i_k,-j_k)}-\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}\right\|=\\&=\left\|\boldsymbol{C}_{j_k}\cdot\boldsymbol{R}_{i_k}\right\|\le\left\|\boldsymbol{C}_{j_k}\right\|\cdot\left\|\boldsymbol{R}_{i_k}\right\|\to\min_{(i_k,j_k)}.\end{aligned}\qquad(5)$$

Здесь символом $\|\circ\|$ обозначена октаэдральная норма объекта $\circ$. Выбор именно такой нормы связан с простотой алгоритма ее вычисления и, что самое главное, устойчивостью получаемых результатов к вычислительным ошибкам.

Так как

$$\left\|\boldsymbol{C}_{j_k}\right\|=\sum_i\left|c_{ij_k}\right|=\frac{\sum_i\left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j_k)\right|}{\left|r_{i_k j_k}\right|},\qquad(6)$$

$$\left\|\boldsymbol{R}_{i_k}\right\|=\sum_j\left|r_{i_k j}\right|=\frac{\sum_j\left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j)\right|}{\left|c_{i_k j_k}\right|},\qquad(7)$$

$$a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j_k)=c_{i_k j_k}r_{i_k j_k}\qquad(8)$$

и, к тому же, j_k – столбец и i_k – строка субматрицы $\boldsymbol{A}_{(-i_k,-j_k)}$ являются нулевыми, то из (5), с учетом (1), имеем уточненное выражение

$$\begin{aligned}&\left[\left\|\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,:)\right\|-\left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j_k)\right|\right]\times\\&\times\left[\left\|\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(:,j_k)\right\|-\left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j_k)\right|\right]\div\\&\div\left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j_k)\right|\to\min_{(i_k,j_k)},\end{aligned}\qquad(8)$$

где

$$\left\|\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(*,j_k)\right\|=\sum_i\left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j_k)\right|,$$

$$\left\|\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,*)\right\|=\sum_j\left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j)\right|.$$

Критерий (8) оказывается легко реализуемым, поскольку нахождение входящих в него норм осуществляется рекуррентно и не требует значительных вычислительных затрат. К тому же для поиска ведущего элемента $a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j_k)$ нет необходимости производить оценки функционала в выражении (8) для всех элементов субматрицы $\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$. Поиск ведущего элемента достаточно осуществить в $n_k \ll n$ ненулевых строках субматрицы $\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$ содержащих наименьшее количество ненулевых элементов. Такой способ поиска ведущего элемента не только обеспечивает устойчивость вычислений, но и уменьшает различие между шаблонами субматриц $\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$ и $\boldsymbol{A}_{(-i_k,-j_k)}$.

Анализируя выражения (5) и (8), отметим, что предельное (нулевое) значение функционала в (8) достигается при условии, когда ведущий элемент выбирается на пересечении строки и столбца, в одном из которых имеется только один элемент отличный от нуля. В этом случае при переходе от субматрицы $\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$ к субматрице $\boldsymbol{A}_{(-i_k,-j_k)}$ ошибок не допускается. В остальных случаях возможно возникновение ошибок компьютерных вычислений, однако их величина будет ограничена тем больше, чем меньше будет значение функционала в выражении (5).

Метод $ICR-$ факторизации матриц

Обращаясь к рекуррентным соотношениям вида (1), определим условия, при которых можно пренебречь влиянием строк и столбцов формируемых факторных матриц на субматрицы. Очевидно, в случае несопоставимости строчных и столбцовых октаэдральных норм соответствующих векторов, а именно

$$\left|c_{ij_k}\right| \cdot \left\|\boldsymbol{R}_{i_k}\right\| << \left\|\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,*)\right\| \tag{9}$$

и

$$\left|r_{i_k j}\right| \cdot \left\|\boldsymbol{C}_{j_k}\right\| << \left\|\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(*,j)\right\|, \tag{10}$$

элементы c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ оказываются несущественными и их можно полагать равными нулю. Для оценивания значимости элементов c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ нет необходимости в предварительном вычислении столбца $\boldsymbol{C}_{j_k}$ и строки $\boldsymbol{R}_{i_k}$, поскольку выражения (9) и (10), с учетом (6) и (7), можно представить в тождественном виде

$$\frac{\left|c_{ij_k}\right|}{\left|c_{i_k j_k}\right|} << \frac{\left\|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,*)\right\|}{\left\|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,*)\right\|} = \frac{\sum_j \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j)\right|}{\sum_j \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j)\right|}, \tag{11}$$

$$\frac{\left|r_{i_k j}\right|}{\left|r_{i_k j_k}\right|} << \frac{\left\|A_{(-i_k,-j_k)}(*,j)\right\|}{\left\|A_{(-i_k,-j_k)}(*,j_k)\right\|} = \frac{\sum_i \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j)\right|}{\sum_i \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j_k)\right|}. \tag{12}$$

Полученные соотношения позволяют оценивать значимость элементов столбца $\boldsymbol{C}_{j_k}$ и строки $\boldsymbol{R}_{i_k}$ основываясь только на соотношениях норм между соответствующими строками и столбцами субматрицы $\boldsymbol{A}_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$. Параметризация выражений (11) и (12) позволяет представить их в виде

$$\frac{\left|c_{ij_k}\right|}{\left|c_{i_k j_k}\right|} < \tau \frac{\sum_j \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j)\right|}{\sum_j \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,j)\right|}, \tag{13}$$

$$\frac{\left|r_{i_k j}\right|}{\left|r_{i_k j_k}\right|} < \tau \frac{\sum_i \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j)\right|}{\sum_i \left|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,j_k)\right|}, \qquad (14)$$

удобном для практического использования. При этом 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 $\tilde{\boldsymbol{C}}_{j_k}$ и строках $\tilde{\boldsymbol{R}}_{i_k}$.

Учитывая тождественность выражений (13) и (14) выражениям (9) и (10), отбрасывание малозначимых элементов c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ в формулах (1) можно интерпретировать как ошибки машинных вычислений, а параметр τ рассматривать в качестве обобщенной характеристики таких ошибок.

Метод факторизации матриц, основанный на формулах (1), с выбором ведущих элементов в соответствии с критерием (8) и принебрежением элементов факторных матриц, удовлетворяющих условиям (13) и (14), называется методом неполной столбцово-строчной факторизации матриц или, кратко, методом $ICR-$факторизации.

В случае $ICR-$факторизации плохо обусловленных матриц чувствительность решений к ошибкам существенно возрастает и, поэтому, параметр τ в (13) и (14) следует выбирать малым настолько, насколько необходимо уменьшить влияние подобных ошибок. Очевидно для 32-разрядных вычислительных систем выбор значения параметра τ меньше величины 10^{-16} смысла не имеет, поскольку такой выбор эквивалентен установлению значения $\tau = 0$ и, следовательно, выполнению полной $CR-$факторизации. В большинстве случаев значение параметра τ устанавливается в пределах $10^{-1} \div 10^{-4}$, что достаточно для построения эффективных предобусловливателей.

Результаты экспериментальных исследований

Тестирование предложенного метода выполнялось на примерах несимметричных матриц, которые использовались в работе [5]. Их основные характеристики отражены в таблице 1. Здесь указаны наименования тестовых матриц, по которым их можно найти в интернете, размерности матриц n, число содержащихся в них ненулевых элементов nz.

Все расчеты выполнялись на вычислительном устройстве Desktop Computer. Его параметры, а также характеристики использованого нами программного обеспечения представлены в таблице 2. Для сравнения здесь отражены характеристики вычислительного устройства IBM System x3850 и программного обеспечения задействованных в работе [5] для факторизации тех же тестовых матриц.

Сопоставление полученных результатов с результатами представленными в работе [5] выполнялось в условиях ограничения требований к используемым ресурсам памяти для размещения факторных матриц $\tilde{\boldsymbol{C}}$ и $\tilde{\boldsymbol{R}}$, теми объемами, которые использовались в [5] для размещения матриц $\tilde{\boldsymbol{L}}$ и $\tilde{\boldsymbol{U}}$.

Таблица 1. Характеристики тестовых матриц

Название матрицы	*n*	*nz*
raefsky5	6 316	167 178
raefsky6	3 402	130 371
ASIC_100ks	99 190	578 890
FEM_3D_thermal1	17 880	430 740
FEM_3D_thermal2	147 900	3 489 300
sme3Da	12 504	874 887
sme3Db	29 067	2 081 063
dc3	116 835	766 396
trans4	116 835	749 800
trans5	116 835	766 396
raefsky1	3 242	293 409
raefsky2	3 242	293 551
raefsky3	21 200	1 488 768
hcircuit	105 676	513 072
ASIC_680ks	682 712	1 693 767
ASIC_320k	321 821	1 931 828
ASIC_320ks	321 671	1 316 085
ASIC_100k	99 340	940 621
epb3	84 617	463 625
poisson3Da	13 514	352 762
sme3Dc	42 930	3 148 656
stomach	213 360	3 021 648

Таблица 2. Характеристики ресурсов используемых для факторизации тестовых матриц

Computer	IBM System x3850	Desktop Computer
Processor	64-bit	32-bit
SMP processors	4	1
Type	Intel Xeon MP	Intel Pentium 4
Clock speed	3.66 GHz	3.0 GHz
Front side bus	667 MHz	800 MHz
L2 cache size	1 MB	1 MB
Memory	DDR2 dual	DDR dual
RAM size	16 GB	1 GB
RAM speed	400 MHz	400 MHz
Operation system	Информация отсутствует	Microsoft Windows XP
Compiler	Fortran–90	C++
Compiler type	Intel Compiler ifort	Microsoft Visual Studio 2008
Optimization	O4	Full

Результаты экспериментов (таблица3) показали близость аппроксимационных свойств предобусловливателей, полученных методами $ICR-$, $left-RIF-Ns-$, $right-RIF-Ns-$, $AINV-$, $ILUC-$факторизации, не взирая на то, что $ICR-$факторизация матриц осуществлялась без привлечения условия (4) для отсечения элементов матриц $\tilde{C}$ и $\tilde{R}$. В большинстве тестов затраты времени на факторизацию оказались сопоставимыми. Преимущества метода $ICR-$факторизации были весьма заметными на матрицах dc3, trans4, trans5, в отношении которых известные методы факторизации использовались без привлечения процедур предварительного упорядочения матричных строк и столбцов. Превосходство заключалось в ускорении сходимости итерационных процедур в случае использования $ICR-$предобусловливателя.

Таблица 3. Количество итераций метода GMRES(30) с разными предобусловливателями

Название матрицы	*ICR*	*lRIF*	*rRIF*	*AINV*	*ILUC*
raefsky5	5	5	5	9	5
raefsky6	4	8	5	9	4
ASIC_100ks	12	10	10	30	8
FEM_3D_thermal1	10	11	9	27	5
FEM_3D_thermal2	9	10	8	23	5
sme3Da	1610	–	2434	–	1903
sme3Db	2193	–	–	–	–
dc3	15	73	73	60	50
trans4	8	25	23	11	21
trans5	10	56	37	17	45
raefsky1	30	33	33	708	118
raefsky2	49	88	67	842	135
raefsky3	87	–	149	–	74
hcircuit	4	29	59	–	11
ASIC_680ks	36	7	7	34	33
ASIC_320k	19	13	16	–	8
ASIC_320ks	2	4	4	16	5
ASIC_100k	21	13	17	221	8
epb3	133	136	104	693	92
poisson3Da	22	26	26	141	16
sme3Dc	2002	–	–	–	–
stomach	6	6	6	74	5

Выводы

Метод $ICR-$факторизации матриц отличается высокими аппроксимационными свойствами, низкими требованиями к используемым ресурсам памяти и устойчивостью вычислений к ошибкам отсечения малозначимых элементов. Такой метод позволяет создавать эффективные программные средства решения больших разреженных систем уравнений.

Литература

1. Саух С.Е.: Метод *CR*–факторизации матриц большой размерности // Электронное моделирование, N6, 2007. – С. 3 – 20.
2. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М., Мир, 1991. – 386 с.
3. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. University of Minnesota, Minneapolis, MN, 2000. – 448 p.
4. Li N., Saad Y., Chow E. Crout versions of ILU for general sparse matrices // SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 25, 2003. – P. 716 – 728.
5. Rafiei A., Bollhöfer M. Robust incomplete factorization for nonsymmetric matrices // *Technical Report 26-2008, TU Berlin, Institute of Mathematicy, July 2008.*
6. Benzi M., Tuma M. A sparse approximate inverse preconditioner for nonsymmetric linear systems // SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 19, 1998. – P. 968 – 994.

Получено 27.05.09