УДК 519.6

С.В. Моисеенко

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА

Аннотация. Представлен обзор итерационных методов решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений большой размерности. Проведен сравнительный анализ методов решения СЛАУ. Показано, что метод обобщённых минимальных невязок (GMRES) для разреженных матриц обладает высокой вычислительной эффективностью при решении задач эллиптического типа с плохо обусловленной матрицей.
Ключевые слова: методы решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности.

Введение

Численное моделирование реальных физических процессов основывается на применении уравнений математической физики различного типа. Дискретные аналоги исходных дифференциальных уравнений приводят к необходимости решения разреженных систем алгебраических линейных уравнений (СЛАУ). Такие системы могут быть очень большими, например, как в сопряженных задачах вычислительной аэродинамики, электродинамики, теплопроводности, механике деформируемого твёрдого тела [1-3]. Основная часть компьютерных ресурсов тратится на решение систем линейных уравнений, поэтому одной из ключевых проблем математического моделирования является выбор оптимального метода решения СЛАУ.

Все используемые на практике методы решения систем линейных алгебраических уравнений можно разделить на две большие группы: прямые и итерационные методы [3, 4]. Под прямым методом решения понимается метод, позволяющий теоретически получить точное значение всех неизвестных в результате конечного числа арифметических операций (метод Крамера). Итерационные методы позволяют находить решение только в виде предела последовательности векторов, построение которого производится одинаковым процессом, называется процессом итераций, или последовательных приближений [4, 5].

Основные аргументы в пользу итерационных методов основаны на экономии компьютерной памяти и процессорного времени. Также преимуществом итерационных методов является удобное применение в современной вычислительной технике. При решении разреженных систем линейных уравнений большой размерности прямые методы становятся неэффективными в силу накопления ошибок округления и большого числа математических операций. Итерационные методы позволяют получить решения системы с заранее определенной погрешностью. Явным плюсом является значительное преимущество перед прямыми методами в скорости сходимости, а также удобная реализация на практике.

Обычно итерационные методы применяются к разреженным системам линейных алгебраических уравнений, которые возникают при конечно-элементной, конечно-разностной или конечно-объемной аппроксимации дифференциальных уравнений (систем уравнений) в частных производных. Итерационные методы часто используются в комбинации с операторами предобуславливания (preconditioning), которые позволяют повысить скорость сходимости данного метода. Выбор предобуславливателя составляет отдельную проблему. Также итерационные методы успешно применяются при решении некоторых больших плотных СЛАУ.

Наиболее эффективными и устойчивыми среди итерационных методов решения таких систем уравнений являются так называемые проекционные методы, и особенно тот их класс, который связан с подпространством Крылова. Они отличаются наибольшей устойчивостью из всех итерационных методов. В работах [4, 5] описаны итерационные методы, особое внимание уделено различным формам предобуславливания. В работе [3] приведен обзор методов решения СЛАУ основанных на подпространстве Крылова. Описание численных алгоритмов итерационных методов решения СЛАУ рассмотрено в [3].

Следует отметить, что в настоящее время отсутствует универсальные методы, одинаково хорошо работающих для разных классов задач. Как правило, задача заключается в том, чтобы найти наиболее эффективный метод для конкретной проблемы. В настоящей работе

 ISSN 1562-9945

проведен сравнительный анализ методов решения СЛАУ для уравнений математической физики эллиптического типа.

Методы решения систем линейных алгебраических уравнений

Итерационные методы бывают двух видов: стационарные и нестационарные.

Стационарный итерационный метод – это метод, который может быть представлен в следующей простой форме

$$x^{k+1} = \mathbf{A}x^k + c,$$

где $\mathbf{A}$ и c не зависят от номера итерации k. Если такая зависимость существует, то метод нестационарный.

Стационарные итерационные методы существуют довольно давно, они простые для понимания и реализации, но, как правило, не столь эффективны в сравнении с нестационарными. Нестационарные методы сравнительно новые, и они могут быть очень эффективными с точки зрения вычислительных затрат.

Скорость, с которой итерационный метод сходится, во многом зависит от спектрального радиуса матрицы. Таким образом, итерационные методы обычно включают вторую матрицу, которая преобразует матрицу $\mathbf{A}$ к матрице с меньшим спектральным радиусом. Матрица преобразования называется матрицей предобуславливания. Хорошее предобуславливание улучшает сходимость итерационного метода. Без предобуславливания итерационный метод может даже не сойтись.

Разработано большое количество итерационных методов. Остановимся на тех, которые иллюстрируют историческое развитие итерационных методов для решения больших разреженных систем линейных уравнений.

Стационарные методы:

- Метод Якоби базируется на решении для каждой переменной локально по другим переменных, одна итерация метода соответствует решению для каждой переменной один раз. Метод прост для понимания и реализации, но сходится медленно.

- Метод Гаусса-Зейделя можно рассматривать как модификацию метода Якоби. Основная идея модификации состоит в том, что новые значения используются здесь сразу же по мере получения, в то время как в методе Якоби они не используются до следующей итерации.

- Метод последовательной верхней релаксации (Successive Overrelaxation – SOR) может быть получен из метода Гаусса-Зейделя путем введения экстраполяционного параметра ω. При оптимальном выборе ω метод может сходиться на порядок быстрее, чем метод Гаусса-Зейделя.

- Метод симметричной последовательной верхней релаксации (Symmetric Successive Over-Relaxation – SSOR) не имеет преимуществ перед SOR как независимый итерационный метод, однако используется в качестве предобуславливателя для нестационарных методов.

Нестационарные методы:

- Метод сопряженных градиентов (Conjugate Gradient – CG) – метод нахождения локального минимума функции на основе информации о ее значении и ее градиента.

- Метод минимальных невязок (MINimum RESidual – MINRES). Этот метод является вычислительной альтернативой для метода сопряженных градиентов для матрицы, коэффициенты которой являются симметричными и положительно неопределенными.

- Метод обобщённых минимальных невязок (Generalized Minimal Residual – GMRES). Данный метод вычисляет последовательность ортогональных векторов (как MINRES) и решает их методом наименьших квадратов. Тем не менее, в отличие от MINRES (и CG), требует хранения всей последовательности, так что необходим большой объем памяти. По этой причине используются поздние версии этого метода, в которых вычисления и затраты на хранение ограничиваются указанием на фиксированное количество векторов, которые будут созданы. Этот метод полезен для произвольных несимметричных матриц.

- Бисопряженные градиенты (BiConjugate Gradient – BiCG). Метод бисопряженных градиентов создает две последовательности векторов сопряженных градиентов, один из которых базируется на системе с оригинальными коэффициентами матрицы $\mathbf{A}$, а другой – на $\mathbf{A}^{\mathbf{T}}$. Вместо ортогонализации каждой последовательности они являются взаимно ортогональными или "биортогональными". Этот метод, как и CG, использует ограниченное количество памяти. Это полезно, когда матрица симметрична, однако сходимость может быть нерегулярной. BiCG требует умножения на коэффициенты матрицы и ее транспонирование на каждой итерации.

 ISSN 1562-9945

- Метод итераций Чебышева рекурсивно определяет многочлены с коэффициентами, выбранными для сведения к минимуму нормы остатка в смысле минимума-максимума. Матрицы коэффициентов должны быть положительно определенными, также требуется знание экстремальных собственных значений. Преимущество в том, что он не требует внутренних произведений.

Сравнительная характеристика итерационных методов

Эффективное решение СЛАУ в значительной мере зависит от выбора итерационного метода. Ниже рассмотрим преимущества и недостатки итерационных методов.

1. Метод Якоби

- Крайне прост в использовании, но если матрица не является диагонально доминирующей, этот метод лучше всего рассматривать как введение в итерационные методы или в качестве предобусловливателя для нестационарных методов.

- Простой в распараллеливании.

2. Метод Гаусса-Зейделя

- Сходимость быстрее, чем у метода Якоби, но в целом не может конкурировать с нестационарными методами.

- Относится к матрицам с диагональным преобладанием или симметричным положительно определенным матрицам.

- Свойства распараллеливания зависят от структуры матрицы коэффициентов. Разные порядки с неизвестными имеют различные степени параллелизма.

- Это частный случай метода SOR, полученный путем выбора $\omega=1$.

3. Метод последовательной верхней релаксации (SOR)

- Ускорение сходимости Гаусса-Зейделя ($\omega > 1$, верхняя релаксация); может привести к сходимости, когда метод Гаусса-Зейделя не сходится ($0 < \omega < 1$, нижняя релаксация).

- Скорость сходимости зависит главным образом от ω; оптимальное значение ω может быть оценено по спектральному радиусу матрицы Якоби.

- Свойства распараллеливания зависят от структуры матрицы коэффициентов. Разные порядки неизвестных имеют различные степени параллелизма.

4. Метод сопряженных градиентов (CG)

- Относится к симметричной положительно определенной системе.

- Скорость сходимости зависит от ряда условий.

- Свойства распараллеливания во многом зависят от матрицы коэффициентов и от структуры предварительной обработки.

5. Метод обобщённых минимальных невязок (GMRES)

- Применяется к несимметричным матрицам.

- GMRES приводит к меньшей невязке для фиксированного числа итераций, но эти шаги становятся все более затратными.

- Для того, чтобы ограничить увеличение вычислительных затрат и количество шагов на одну итерацию, необходим перезапуск GMRES.

- GMRES требует только матрично-векторные произведения с матрицей коэффициентов.

- Число внутренних произведений возрастает линейно вместе с числом итераций до точки перезапуска. В реализации, основанной на простом процессе Грама-Шмидта внутренние произведения независимы, так что вместе они означают лишь одну точку синхронизации. Более стабильная реализация базируется на модифицированной ортогонализации Грама-Шмидта и имеет по одной точке синхронизации на каждое внутреннее произведение.

6. Метод бисопряженных градиентов (BiCG)

- Применяется к несимметричным матрицам.

- Требует матрично-векторное произведение коэффициентов матрицы и транспонированной матрицы.

- Свойства распараллеливания аналогичны свойствам CG.

7. Метод итераций Чебышева

- Применяется к несимметричным матрицам.

- Вычислительная структура аналогична CG, но в ней нет точек синхронизации.

- Адаптивный метод Чебышева может быть использован в сочетании с такими методами как CG, так и GMRES.

Выбор "лучшего" метода для данного класса задач в значительной степени – это вопрос проб и ошибок. Хотя из всего многообразия итерационных методов наиболее работоспособными являются метод сопряженных градиентов (CG), метод обобщённых минимальных невязок (GMRES) и метод бисопряженных градиентов (BiCG).

 ISSN 1562-9945

Результаты и обсуждение

Сравнение нестационарных итерационных методов решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений большой размерности проведем на задаче о распределении электрического потенциала в заданной области. Уравнение электрического поля представляет собой уравнение Лапласа $\nabla(\varepsilon_r \nabla\varphi) = 0$. В качестве начальных условий для уравнения Лапласа задавалось нулевое распределение электрического потенциала в области. Данное уравнение решается, используя приложенное напряжение к электродам как граничное условие, а также соответствующие значения относительной диэлектрической проницаемости для воздуха и диэлектрика. К открытому электроду прикладывается напряжение $\varphi = 30$ кВ, а к изолированному – нулевой потенциал. На внешних границах ставится условие Неймана $\partial\varphi / \partial\ell_n = 0$. Геометрия расчетной области приведена на рис. 1.

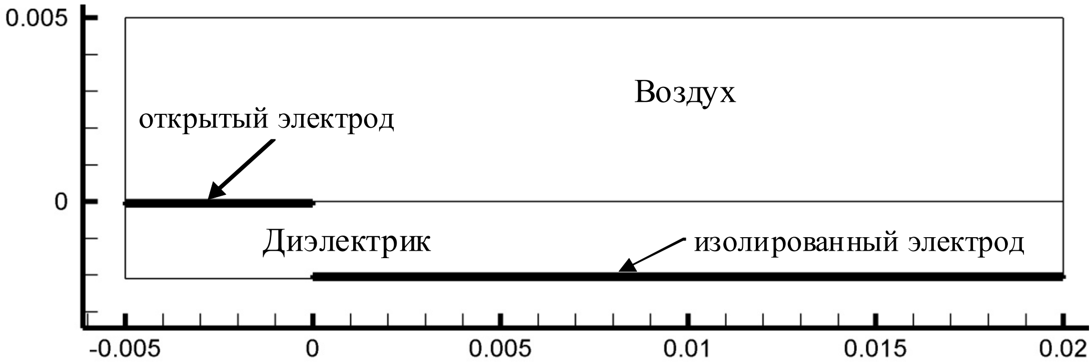

Рисунок 1 – Геометрия расчетной области

Диэлектрик представляет собой керамический материал Macor с относительной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_r = 6$ и толщиной $d = 2{,}1$ мм. Относительная диэлектрическая проницаемость воздуха $\varepsilon_r = 1{,}0006$. Электроды представляют собой полоски меди. Длина открытого электрода составляет 5 мм, а изолированного – 25 мм. Начало координат совпадает с правым краем открытого электрода.

Многоблочная структурированная сетка, описывающая геометрию расчетной области, состоит из 5 блоков, с общим количеством узлов 17275 (рис. 2). Минимальный шаг сетки вблизи правого края открытого электрода $1 \cdot 10^{-5}$м.

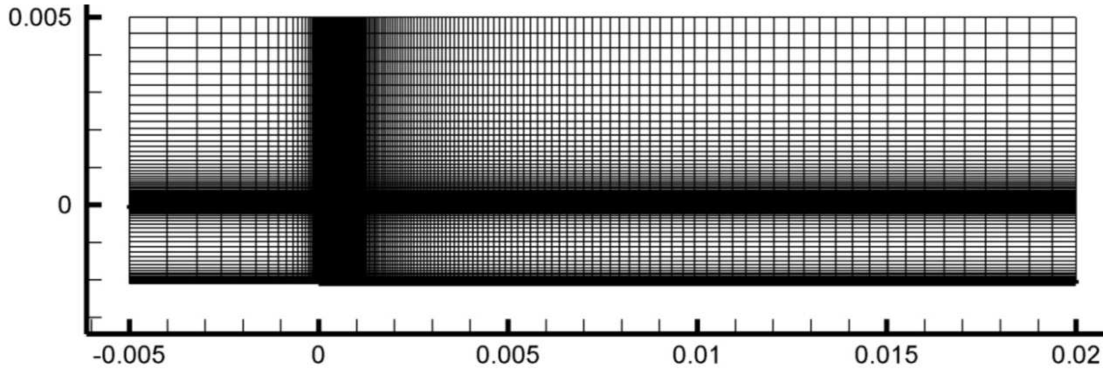

Рисунок 2 – Многоблочная структурированная сетка

После дискретизации исходного уравнения формируется разреженна матрица **A** с общим числом ненулевых элементов 94663, включая диагональные.

Уравнение Лапласа относится к эллиптическому типу дифференциальных уравнений. Так как данное уравнение содержит переменные коэффициенты (при вторых производных), то к нему не могут быть применены специальные методы решения типа быстрого преобразования Фурье. Поэтому возникает вопрос о том, какой лучше использовать солвер для полученной системы линейных алгебраических уравнений.

Апроксимация уравнения Лапласа приводит к формированию симметричной положительно определенной матрицы с большим спектральным радиусом. Т.е. матрица является плохо обусловленной.

Для сравнения выберем наиболее популярные нелинейные методы решения СЛАУ метод сопряженных градиентов (CG), метод обобщённых минимальных невязок (GMRES) и метод бисопряженных градиентов (BiCG). В качестве предобуславливателя используется ILU(0) разложение. Линейные методы не рассматриваются в силу их изначально плохой сходимости решения для данного класса уравнений.

Получено распределение электрического потенциала в области (рис. 3). Для наглядности результаты отнесены к максимальному значению напряжения $\varphi = 30$ кВ.

 ISSN 1562-9945

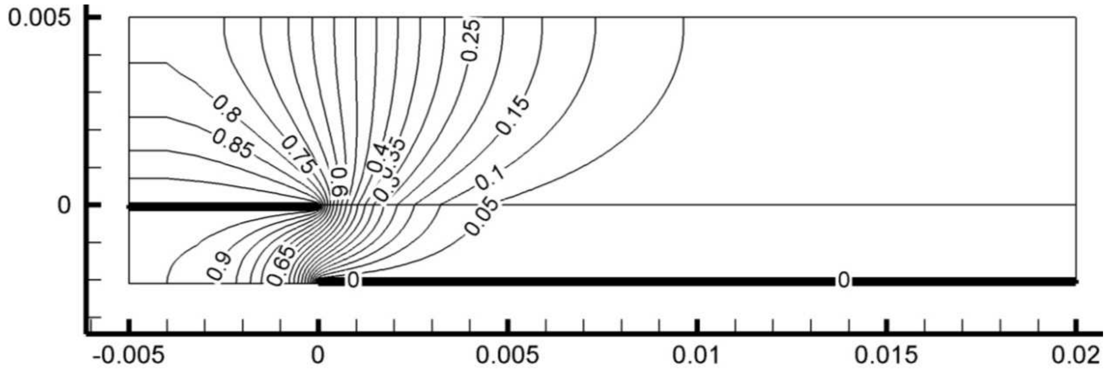

Рисунок 3 – Распределение электрического потенциала в области отнесенного к максимальному значению

Критерием сходимости выступает норма невязки. Система линейных алгебраических уравнений считается решенной, если текущая норма невязки меньше начальной на семь порядков $\|R_i\|/\|R_0\|<10^{-7}$.

Изменение нормы невязки от числа итераций для методов CG, GMRES и BiCG приведены на рис. 4. Исходя из полученных результатов видно, что метод сопряженных градиентов не приводит к сходимости. Метод бисопряженных градиентов хотя и приводит к решению, однако скорость сходимости, а также поведение вселяет некоторую неуверенность в надежность данного метода. И только метод обобщённых минимальных невязок показал хорошую и устойчивую сходимость при решении СЛАУ. Поэтому данный солвер рекомендуется использовать как робастный при решении систем линейных алгебраических уравнений с произвольной матрицей $\mathbf{A}$.

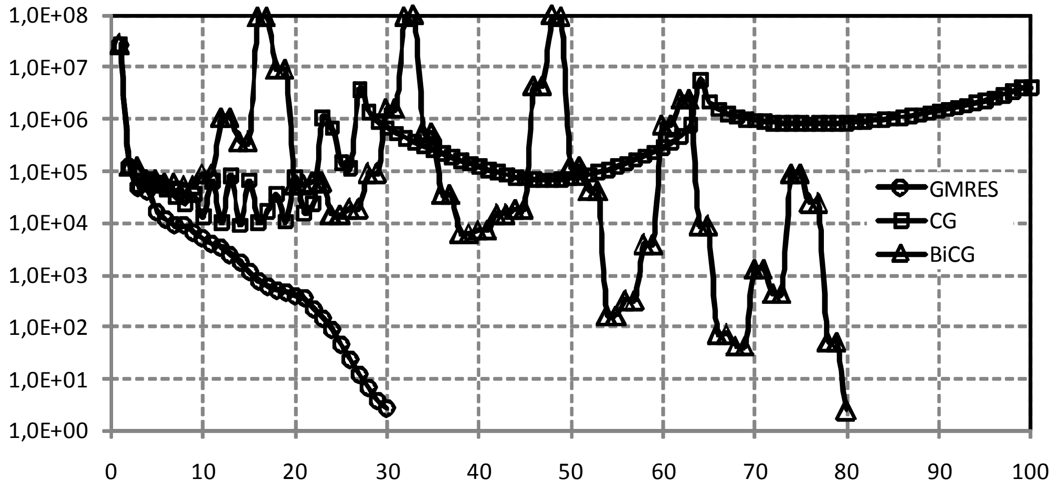

Рисунок 4 – Изменение нормы невязки от числа итераций

Выводы

1. Проведен обзор итерационных методов решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений большой размерности.

2. На основе преимуществ и недостатков существующих определен круг наиболее эффективных методов решения систем линейных алгебраических уравнений с несимметричной положительно определенной матрицей.

3. Установлено, что метод обобщённых минимальных невязок (GMRES) для разреженных матриц обладает высокой вычислительной эффективностью при решении задач эллиптического типа с плохо обусловленной матрицей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Моисеенко, С.В. Расчет априорных вероятностей для решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона методом Монте-Карло [Текст] / С.В. Моисеенко, Ю.И. Николаенко, П.М. Зуб // Вестник Херс. нац. техн. ун-та. – Херсон: ХНТУ, 2010. – Вып. №3 (39). – С. 345 – 349.
2. Редчиц, Д.А. Управление вихревой дорожкой Кармана с помощью плазменных актуаторов [Текст] / Д.А. Редчиц, О.Б. Полевой, С.В. Моисеенко // Вестник Днепропетровского ун-та. Механика. – Днепропетровск: ДНУ, 2013. – Т.21, № 5, Вып. 17, Т. 1. – С. 63-80.
3. Van der Vorst, H.A. Iterative Methods for Large Linear Systems [Text] / H.A. van der Vorst; Utrecht University. – Utrecht, The Netherlands, 2002 – 195 p.
4. Saad, Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems [Text] / Y. Saad; Society for Industrial and Applied Mathematics. – Boston, USA, 528– 195 p.
5. Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods [Text] / M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. Van der Vorst; Society for Industrial and Applied Mathematics. – Philadelphia, USA, 1994. – 195 p.

 ISSN 1562-9945