

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МАТРИЦЫ СЛАУ НА СХОДИМОСТЬ НЕКОТОРЫХ КРЫЛОВСКИХ МЕТОДОВ.

1. Введение

Моделирование сложных физических процессов, описываемых системами УРЧП, часто приводит к необходимости решения систем линейных алгебраических уравнений вида $Ax = b$ ($A \in R^{N \times N}$) с разреженными матрицами A большого размера.

Методов решения СЛАУ существует весьма много. В случае больших разреженных матриц обычно используют итерационные методы. Одними из самых эффективных на сегодняшний день являются методы, основанные на использовании подпространств Крылова [1]. Во всех этих методах начальное приближение к точному решению системы x_0 уточняют вектором-поправкой δ_x , принадлежащим некоему m -мерному подпространству $K \subset R^N$. В качестве K используется подпространство Крылова

$$K = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{m-1}r_0\},$$

где $r_0 = b - Ax_0$ - невязка на начальной итерации. Поправка должна удовлетворять следующему условию (условию Петрова-Галеркина):

$$b - A(x_0 + \delta_x) \perp L,$$

где L – другое m -мерное подпространство R^N . Приближенное решение, генерируемое рассматриваемыми методом, выглядит следующим образом:

$$x_m = x_0 + V_m y_m,$$

где $V_m = [v_1; v_2; \dots; v_m]$ – матрица, составленная из базисных векторов подпространства K , а y_m – вектор коэффициентов. В качестве подпространства L обычно выбирают $L = K$ (методы BiCG, QMR и др.), либо $L = AK$ (метод GMRES).

Весьма важным является вопрос о влиянии различных свойств матрицы СЛАУ на сходимость итерационных методов. Для методов Крылова существует ряд оценок сходимости (см., например, [1], [2]). К сожалению, при расчетах на ЭВМ (где арифметика является конечной) поведение метода может быть совсем не таким, как в точной арифметике (см. [3]). Поэтому необходимо проводить эмпирические исследования (т.е. вычислительные эксперименты) на тестовых СЛАУ.

Большое количество матриц, которые можно использовать в качестве тестовых, собрано в коллекциях университета Флориды [4] и MatrixMarket [5]. Эти матрицы получены из реальных задач, относящихся к разным областям знания (физика, геология и др.). Обширные исследования методов Крыловского типа с различными предобуславливателями на этих матрицах описаны в [6], [7] и др.

Другой подход – генерация тестовых матриц с помощью специальных алгоритмов. Такой способ позволяет получать матрицы с определенными свойствами (заданный определитель, портрет, известные свойства спектра). В качестве примеров можно привести матрицы Коши, Гира и др. Большое количество (более 50) генерируемых матриц можно найти в Test Matrix Toolbox for Matlab [8].

В данной статье предлагаются два новых типа генерируемых тестовых матриц (типы А и В). Собственные значения (с.з.) этих матриц удовлетворяют условию $|\lambda| \leq r$. Вещественные части с.з. разбивают отрезок $[-r, r]$ на $N-1$ равный отрезок. При этом матрица типа А имеет порядок N , ее спектр состоит из N простых вещественных с.з. Матрица типа В является блочной, размером N на N блоков. С.з. такой матрицы располагаются на окружности радиуса r с центром в начале координат на комплексной плоскости. Количество различных с.з. равно $2N-2$. Крайние с.з. ($\lambda_1 = -r$ и $\lambda_{2N-2} = r$) являются кратными, остальные простыми. Отметим, что матрицы обоих типов являются несимметричными.

Алгоритмы построения описанных тестовых матриц были реализованы в виде подпрограмм в среде Matlab. Входными параметрами являются числа N и r , для матриц типа В необходимо также задавать кратности крайних с.з.

Основная цель статьи – с помощью вычислительного эксперимента попытаться установить некоторые зависимости между спектральными характеристиками матрицы СЛАУ и сходимостью методов Крыловского типа. Описанные выше тестовые матрицы на наш взгляд являются интересным инструментом для подобного рода исследований. Это обеспечивается тем, что все собственные значения известны, и их можно изменять, задавая параметры N и r . Отметим, что в спектрах наших матриц вещественная часть минимального с.з. будет сколь угодно близким к нулю при увеличении N . Кроме того, в этих спектрах отсутствует кластеризация. Принято считать, что на таких матрицах итерационные методы дают слабые результаты (см. [9]). Таким образом, исследования проводятся в "тяжелых условиях".

В работе рассматривались следующие итерационные методы Крыловского типа: BiCG(biconjugate gradients), BiCGStab(biconjugate gradients stabilized), QMR(quasiminimal residual), CGS(conjugate gradients

squared), GMRES(m) (generalised minimal residual с рестартами на m -й итерации). В качестве предобуславливателя использовался широкоизвестный ILU(k) (incomplete LU decomposition, параметр k определяет заполнение предобуславливателя).

Все вычислительные эксперименты с итерационными методами и предобуславливателями проводились в среде Matlab 7.4 на ПК с процессором Intel Celeron M частотой 1.6 ГГц, ОЗУ 640 Мб. В расчетах использовались СЛАУ с тестовыми матрицами типов А и В различных порядков. Правые части генерировались искусственно – так, чтобы решением СЛАУ был бы вектор, состоящий из единиц. Результаты тестов сведены в табл. 1-7. Числа в ячейках обозначают количество итераций, за которое метод сошелся, т.е. была достигнута точность $1.e - 6$. Кроме того используются обозначения: '>400' – метод не сошелся за предельное количество итераций, равное 400; 'АВОСТ' – произошло деление на ноль; 'СТАГН' – метод стагнировал, т.е. две последующие итерации совпали.

Отметим, что в некоторых таблицах количество итераций для BiCGStab имеет вид $n+0.5$, где n – натуральное число. Это означает, что было сделано n итераций метода, а на следующей произошел выход из цикла после проверки выполнения условия сходимости в середине итерации. В реализации BiCGStab, используемой в Matlab, их две – в середине и в конце итерации.

Структура основной части статьи следующая: в п. 2 описывается процесс построения матриц типа А. Затем в п. 3 изложены основные результаты вычислительных экспериментов с матрицами этого типа. В п. 4 представлен алгоритм построения матриц типа В. П. 5 посвящен результатам вычислительных экспериментов с такими матрицами. Основные выводы даны в п. 6.

Автор выражает благодарность Николаеву Е.С. за постановку задачи и ценные обсуждения.

2. Тестовая матрица типа А

Построим квадратную вещественную матрицу $A \in R^{N \times N}$, обладающую следующими свойствами.

1) Все собственные значения различны, вещественны и равномерно распределены по отрезку $[-r, r]$. Совокупность с.з. описывается формулой:

$$\lambda_i = -r + (i-1) h_r, \quad i = \overline{1, N}. \quad (1)$$

Здесь $h_r = \frac{2r}{N-1}$ – расстояние между двумя соседними с.з. Отметим, что крайние (минимальное и максимальное) с.з. совпадают с границами

отрезка: $\lambda_1 = -r$, $\lambda_N = r$. Значения N будем брать только четными, что обеспечит невырожденность матрицы A .

2) Матрица должна быть разреженной, ненулевые элементы располагаются только на пяти диагоналях. Более точно: элемент $a_{ij} \neq 0$, только если пара (i, j) принадлежит одному из следующих множеств пар индексов:

главная диагональ	$M = \{(i, j) : j = i, i = \overline{1, N}\},$
первая верхняя диагональ	$U_1 = \{(i, j) : j = i + 1, i = \overline{1, N - 1}\},$
первая нижняя диагональ	$L_1 = \{(i, j) : j = i - 1, i = \overline{2, N}\},$
внешняя верхняя диагональ	$U_2 = \{(i, j) : j = i + p - 1, i = \overline{1, N - p + 1}\},$
внешняя нижняя диагональ	$L_2 = \{(i, j) : j = i - p + 1, i = \overline{p, N}\}.$

Здесь p – параметр, определяющий положение внешних диагоналей. Подобный портрет имеют матрицы, получающиеся при дискретизации эллиптических операторов в прямоугольнике на сетке из $N_x \times N_y$ узлов. В этом случае положение внешних диагоналей определяется количеством узлов сетки по направлению x и $p = N_x + 1$.

Определим следующие параметры: $i_u = N + 1 - p$ – номер строки, в которой заканчивается верхняя внешняя диагональ U_2 , и $i_d = p$ – номер строки, в которой начинается нижняя внешняя диагональ L_2 . Если $i_u \geq i_d$, то происходит "перекрытие" внешних диагоналей: в строках с номерами $i_d \leq i \leq i_u$ есть элемент $a_{ij} \neq 0$, $(i, j) \in L_2$ и элемент $a_{ij} \neq 0$, $(i, j) \in U_2$ (см. рис. 1, черными квадратиками отмечены ненулевые элементы матрицы). Если $i_u < i_d$, то "перекрытия" не происходит (см. рис. 2).

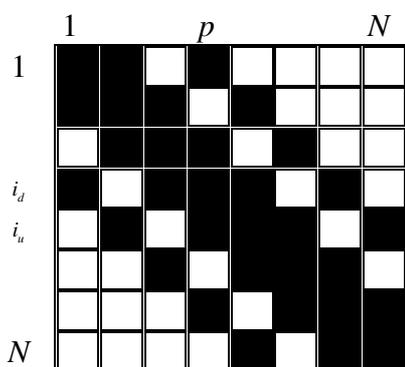


рис.1 Вариант с "перекрытием"
 $N = 8, p = 4,$
 $i_d = 4, i_u = 5.$

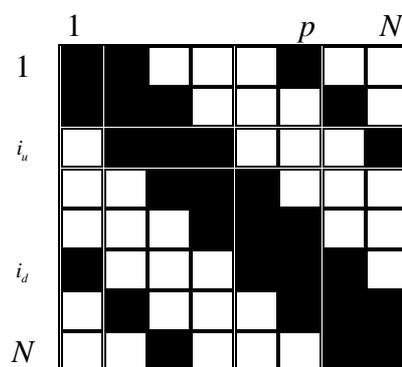


рис.2 Вариант без "перекрытия"
 $N = 8, p = 6,$
 $i_d = 6, i_u = 3.$

Легко подсчитать, сколько ненулевых элементов расположено в каждой строке нашей матрицы. Для этого введем функцию $nnz(i)$ – количество ненулевых элементов в i -й строке матрицы. Тогда

$$\begin{array}{l} \text{при } i_u < i_d \\ \text{(матрица без "перекрытия")} \end{array} \quad nnz(i) = \begin{cases} 3 & \text{при } i=1, i=N, i_u < i < i_d, \\ 4 & \text{при } 2 \leq i \leq i_u, i_d \leq i < N; \end{cases}$$

$$\begin{array}{l} \text{при } i_u \geq i_d \\ \text{(матрица с "перекрытием")} \end{array} \quad nnz(i) = \begin{cases} 3 & \text{при } i=1, i=N, \\ 4 & \text{при } 2 \leq i < i_d, i_u < i < N, \\ 5 & \text{при } i_d \leq i \leq i_u. \end{cases}$$

Кроме того, для каждой i -й строки определим множество позиций, находящихся вне главной диагонали, в которых стоят ненулевые элементы данной строки. Это будет множество номеров столбцов j ($j \neq i$) таких, что $a_{ij} \neq 0$. Снова возникает два варианта в зависимости от наличия "перекрытия" в матрице:

$$\begin{array}{l} \text{при } i_u < i_d \\ \text{(матрица без} \\ \text{"перекрытия")} \end{array} \quad \Theta(i) = \begin{cases} \{2, p\} & \text{при } i=1, \\ \{i-1, i+1, i+p-1\} & \text{при } 2 \leq i \leq i_u, \\ \{i-1, i+1\} & \text{при } i_u < i < i_d, \\ \{i-p+1, i-1, i+1\} & \text{при } i_d \leq i < N, \\ \{N-p+1, N-1\} & \text{при } i=N; \end{cases}$$

$$\begin{array}{l} \text{при } i_u \geq i_d \\ \text{(матрица с} \\ \text{"перекрытием")} \end{array} \quad \Theta(i) = \begin{cases} \{2, p\} & \text{при } i=1, \\ \{i-1, i+1, i+p-1\} & \text{при } 2 \leq i < i_d, \\ \{i-p+1, i-1, i+1, i+p-1\} & \text{при } i_d \leq i \\ \{i-p+1, i-1, i+1\} & \text{при } i_u \leq i < N, \\ \{N-p+1, N-1\} & \text{при } i=N. \end{cases}$$

Теперь все готово для того, чтобы задать ненулевые элементы матрицы A :

$$a_{ii} = -r + (i-1) \frac{2r}{N-1}, \quad \text{где } i = \overline{1, N}, \quad (2)$$

$$a_{ij} = \xi \frac{h_r}{nnz(i)-1}, \quad \text{где } j \in \Theta(i), i = \overline{1, N}. \quad (3)$$

В формуле (3) фигурирует ξ – малый положительный параметр. Легко показать, что при $\xi \rightarrow 0$ собственные значения матрицы A будут сколь угодно приближаться к элементам главной диагонали. В самом деле, для нашей матрицы круги Гершгорина, которые описываются формулой

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad i = \overline{1, N}, \quad (4)$$

будут изолированы. Из этого следует (см. [10]), что в каждом из них содержится ровно по одному с.з. описанной тестовой матрицы. Кроме того, все с.з. будут вещественными. Согласно (4) радиус каждого круга – это сумма модулей внедиагональных элементов i -й строки. Для тестовой матрицы радиусы всех кругов будут равны ξh_r (в силу (3)). При уменьшении радиусов кругов ($\xi \rightarrow 0$) собственные значения будут приближаться к их центрам (т.е. к элементам главной диагонали).

Вычислительный эксперимент показывает, что уже при $\xi = \frac{1}{64}$ собственные значения матрицы будут с большой точностью равны диагональным элементам.

3. Вычислительные эксперименты с матрицами типа А.

В этом пункте приведены результаты тестов итерационных методов на СЛАУ с матрицами типа А различного порядка N . Значение параметра r во всех тестах равно 1.

	$N = 52$	$N = 102$	$N = 152$	$N = 202$	$N = 252$
BiCGstab	90.5	204.5	315.5	>400	>400
BiCG	74	150	242	322	>400
CGS	76	156	234	334	396
QMR	72	148	226	>400	388
GMRES(30)	45	174	357	>400	>400

Табл.1 Результаты вычислительных экспериментов с матрицами типа А различных порядков N с $p = 10$ без предобуславливания

	$N = 52$	$N = 102$	$N = 152$	$N = 202$	$N = 252$
BiCGstab	102.5	205.5	352.5	>400	>400
BiCG	70	188	384	316	>400
CGS	78	>400	232	312	>400
QMR	68	200	328	310	>400
GMRES(30)	45	173	357	>400	>400

Табл.2 Результаты вычислительных экспериментов с матрицами типа А различных порядков N с $p = 20$ без предобуславливания

Для начала выясним, как влияет положение внешних диагоналей U_2 и L_2 на сходимость итерационных методов. Сравним результаты тестов методов для случаев $p=10$ и $p=20$ (табл. 1, 2). Значения в соответствующих ячейках таблиц близки между собой, отличаясь не более чем в 1.6 раз (рассматриваем только ячейки со значениями меньшими 400). На обеих таблицах есть по одному "всплеску": в случае $p=10$ метод QMR при $N=202$ не сошелся за 400 итераций, а при $N=252$ – сошелся за 388 итераций; аналогично, при $p=20$ метод CGS при $N=102$ не сошелся за 400 итераций, в то время как при $N=152$ сошелся за 232 итерации. Таким образом, *рост количества итераций при увеличении N (ожидаемый нами, т.к. минимальное с.з. при этом уменьшается) не является монотонным*. При $p=20$ кроме упомянутых "всплесков" есть еще уменьшение количества итераций методов BiCG и QMR при увеличении N с 152 до 202. На основании сравнения табл. 1 и 2 можно сделать вывод, что при $p=10$ рост числа итераций несколько лучше коррелирует с ростом N , чем при $p=20$, т.е. сходимость всех методов является более предсказуемой.

В связи с этим для исследования сходимости предобусловленных методов берем матрицы A с p равным 10. В качестве предобуславливателя использовался ILU(1). Результаты экспериментов приведены в табл. 3. Сравнение с табл. 1 показывает, что предобуславливатель ILU(1) на матрицах типа A дает очень хорошие результаты – число итераций удается снизить до 1-3, причем для больших N результаты даже лучше.

	$N = 52$	$N = 102$	$N = 152$	$N = 202$	$N = 252$
BiCGstab	1.5	1.5	1.5	1	1
BiCG	4	3	3	2	2
CGS	2	2	2	1	1
QMR	4	3	3	2	2
GMRES(30)	1	1	1	1	1

Табл.3 Результаты вычислительных экспериментов с матрицами типа A различных порядков N с предобуславливателем ILU(1)

4. Тестовая матрица типа B

Матрица A , описанная в п.2, имеет вещественные с.з., равномерно распределенные на отрезке $[-r, r]$. Возникает вопрос – как изменится сходимость итерационных методов, если у собственных значений появятся небольшие по абсолютной величине мнимые части, а вещественные части останутся прежними?

Попытаемся ответить на этот вопрос, построив тестовую матрицу другого типа (назовем его типом В). Эта матрица обладает следующими свойствами:

1) Собственные значения лежат на окружности радиуса r с центром в нуле на комплексной плоскости;

2) Матрица имеет блочно-диагональную структуру:

$B = \text{diag} (B_1, B_2, \dots, B_N)$. Каждый из блоков B_k является матрицей 3×3 и имеет наперед заданные с.з.

$$\lambda_1^k = \begin{cases} -r, & k < d_1 \\ r, & k \geq d_1 \end{cases}, \quad \lambda_2^k = p_k + iq_k, \quad \lambda_3^k = \overline{\lambda_2^k},$$

где $p_k = -r + (k-1)h_r$, $q_k = \sqrt{r^2 - p_k^2}$, $k = \overline{1, N}$. Число N будем брать четным, чтобы матрица B была невырожденной. Параметр h_r имеет то же значение, что и в формуле (1). Чтобы добиться таких спектральных свойств, определим элементы каждого блока B_k следующим образом

$$\begin{aligned} b_{11}^k &= \lambda_1^k, & b_{12}^k &= \lambda_1^k (\lambda_1^k - 2p_k) + (p_k^2 + q_k^2) - 1, & b_{13}^k &= 0, \\ b_{21}^k &= -1, & b_{22}^k &= 2p_k - \lambda_1^k, & b_{23}^k &= -1, \\ b_{31}^k &= 0, & b_{32}^k &= 1, & b_{33}^k &= \lambda_1^k. \end{aligned} \quad (5)$$

Отметим, что вообще говоря, элементы b_{21}^k , b_{23}^k и b_{32}^k могут быть определены произвольно.

Спектр матрицы B будет объединением спектров всех B_k , $k = \overline{1, N}$ (см. [10]). Он содержит $2N - 2$ различных собственных значений и описывается формулой:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -r, \\ \lambda_{2k} &= p_k + iq_k, \quad \lambda_{2k+1} = p_k - iq_k \quad (k = \overline{1, N-1}), \\ \lambda_{2N-2} &= r. \end{aligned} \quad (6)$$

Крайние с.з. являются кратными: $\lambda_1 = -r$ имеет кратность d_1 , $\lambda_{2N-2} = r$ имеет кратность d_2 , причем $d_1 + d_2 = N + 4$.

5. Вычислительные эксперименты с матрицами типа В

Ниже приведены результаты вычислительных экспериментов для $r = 1$. В первом эксперименте исследуется влияние соотношения чисел d_1 и d_2 на сходимость различных итерационных методов. В табл. 4 приведены результаты экспериментов с матрицами типа В с различными d_1 и d_2 . Оказывается, что большинство методов сходится лучше, если кратности d_1 и d_2 близки друг к другу. Исключение составляет метод GMRES, который сходится лучше, когда кратности далеки друг от друга. Отметим, что если GMRES(30) в этом эксперименте сходился за число

итераций не больше 60, то GMRES(10) превышал 400 итераций при всех d_1 .

	$d_1 = 19$	$d_1 = 13$	$d_1 = 11$	$d_1 = 9$	$d_1 = 3$
BiCGstab	>400	АВОСТ	>400	>400	>400
BiCG	306	42	42	42	102
CGS	>400	47	50	54	СТАГН
QMR	312	44	42	42	160
GMRES(30)	34	45	58	52	42

Табл.4 Результаты вычислительных экспериментов с матрицей типа В порядка $N=20$ с различными кратностями крайних с.з. d_1 и d_2

Для последующих экспериментов берем $d_1 = 0.5(N + 2)$. Сравним сходимость методов Крыловского типа на матрицах типа А и В. При фиксированном N в спектрах этих матриц присутствуют с.з. с одинаковыми вещественными частями (см. формулы (1) и (6)); спектр матриц типа А вещественный, а с. з. матриц типа В по модулю не больше r .

Вычислительные эксперименты были проведены для небольших N , т.к. при $N \geq 44$ все методы на СЛАУ с матрицами типа В расходятся. Результаты экспериментов с матрицами типа А и В для этих значений N представлены в табл. 5 и 6 соответственно. Оказывается, что сходимость на матрицах с комплексным спектром значительно хуже – количество итераций больше в 2-4 раза, при росте N соотношение ухудшается. Метод BiCGStab на матрицах типа В, лишь при $N = 8$ сходится за число итераций, меньше 400.

	$N = 16$	$N = 20$	$N = 24$	$N = 32$	$N = 40$	$N = 44$
BiCGstab	33.5	37.5	40.5	50.5	73.5	94.5
BiCG	16	22	26	38	50	60
CGS	20	26	30	44	54	68
QMR	16	22	26	36	48	60

Табл.5 Результаты вычислительных экспериментов с матрицами типа А различных порядков N без предобуславливания

N	8	16	20	24	32	40	44
BiCGstab	41.5	АВОСТ	АВОСТ	АВОСТ	АВОСТ	АВОСТ	АВОСТ
BiCG	18	34	42	86	118	212	>400
CGS	18	36	52	86	117	>400	>400
QMR	18	34	42	86	122	231	>400
GMRES(30)	1	10	58	>400	>400	>400	>400

Табл.6 Результаты вычислительных экспериментов с матрицами типа В различных порядков N без предобуславливания

	$N = 8$	$N = 16$	$N = 20$	$N = 24$	$N = 32$	$N = 40$	$N = 44$
BiCGstab	10.5	18	21.5	21.5	23.5	22	22
BiCG	12	23	28	31	36	38	38
CGS	11	17	19	19	19	19	20
QMR	12	23	28	33	36	38	38
GMRES(30)	1	1	1	1	2	2	2

Табл.7 Результаты вычислительных экспериментов с матрицами типа В различных порядков N с предобуславливателем ILU(1)

Теперь посмотрим, насколько эффективен предобуславливатель ILU(1) на матрицах типа В. Табл. 7 показывает, что улучшения сходимости есть, хотя и не столь значительные, как на матрицах типа А. Количество итераций удается понизить в 1.5-6 раз. Отдельно отметим предобусловленный GMRES(30), который сходится за 1-2 итерации.

6. Заключение.

Построенные в данной работе матрицы оказались весьма удобным и гибким инструментом тестирования итерационных методов решения СЛАУ. С их помощью удалось провести разнообразные вычислительные эксперименты. В них сравнивалась сходимость методов на матрицах с разным портретом (при фиксированном порядке матриц и спектре), с разной кратностью собственных значений (множество различных с.з. было неизменным), а также матрицы с одинаковыми вещественными, но разными мнимыми частями с.з. (матрицы типов А и В с одинаковым N).

Этими экспериментами не исчерпываются возможности описанных тестовых матриц. Изменяя соответствующим образом формулы (3) и (5), можно получать матрицы с самыми разными спектральными свойствами. Дальнейшие исследования итерационных методов на СЛАУ с такими матрицами, вероятно, помогут более детально изучить влияние различных матричных характеристик на сходимость в условиях конечной арифметики.

Литература.

1. *Y. Saad* Iterative Methods for Sparse Linear Systems. PWS Publishing Company, 1996
2. *Николаев Е.С.* Методы решения систем уравнений с разреженными матрицами. // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Сер. Б. Т.VII - 1. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме. М.: Янус-К. 2009 г., с.345-548

3. *Дж.Деммель* Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. М., Мир, 2001, 430 с.
4. University of Florida Matrix Collection
www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/
5. MatrixMarket Sparse Matrix collection
<http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
6. *T. George, A.Gupta, V.Sarin* An empirical analysis of iterative solver performance for SPD systems // IBM research report, 2009
7. *J. Mayer* A numerical evaluation of preprocessing and ILU-type preconditioners for the solution of unsymmetric sparse linear systems using iterative methods // ACM transactions on mathematical software, vol.36, no. 1, Article 1, 2009
8. *N. J. Higham* The Matrix Computation Toolbox
www.ma.man.ac.uk/~higham/mctoolbox
9. *Ke Chen* Matrix preconditioning techniques and applications. UK, Cambridge University Press
10. *Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А.* Матрицы и вычисления. - М.:Наука-1984