УДК 519.612

С. Е. Саух, д-р техн. наук
Ин-т проблем моделирования
в энергетике им.Г.Е.Пухова НАН Украины
(Украина, 03164, Киев, ул. Генерала Наумова, 15,
тел. (044) 4249164, E-mail:saukh@svitonline.com)

Неполная столбцово-строчная факторизация матриц для итерационного решения больших систем уравнений

Для формирования предобусловливателей предложен метод неполной столбцово-строчной (*ICR*) факторизации несимметричных матриц. Метод не требует перестановок строк и столбцов в субматрицах. Получаемые факторные матрицы не являются треугольными. Оригинальная процедура поиска ведущего элемента в субматрице по критерию минимума расхождения по норме Фробениуса между преобразуемой и преобразованной субматрицами обеспечивает устойчивость вычислений для плохо обусловленных матриц. В методе *ICR*-факторизации применена оригинальная оценка значимости элементов факторных матриц, основанная на сопоставлении норм строк и столбцов преобразуемых и вычитаемых субматриц. Приведены примеры решения тестовых систем уравнений с использованием итерационных методов проекций решений на подпространства Крылова, подтверждающие преимущества предложеного метода.

Для формування передобумовлювачів запропоновано метод неповної стовпцево-рядкової (*ICR*) факторизації несиметричних матриць. Метод не потребує перестановок рядків і стовпців у субматрицях. Одержувані факторні матриці не є трикутними. Оригінальна процедура пошуку провідних елементів в субматрицях за критерієм мінімальної розбіжності по нормі Фробеніуса між перетворюваною і перетвореною субматрицями забезпечує стійкість обчислень для погано обумовлених матриць. У методі *ICR*-факторизації застосовано оригінальну оцінку значимості елементів факторних матриць, базовану на зіставленні норм рядків і стовпців перетворюваних субматриць та субматриць, що віднімаються. Наведено приклади розв'язку тестових систем рівнянь з використанням ітераційних методів проекцій розв'язків на підпростори Крилова, які підтверджують переваги запропонованого методу.

Ключевые слова: разреженные матрицы, неполная факторизация, предобусловливатель, ведущие элементы, неполная столбцово-строчная факторизация.

Метод *CR*-факторизации матриц [1] основан на последовательности действий, выполняемых над заданной $n \times n$ матрицей A в соответствии с формулами

$$
\begin{gathered}
A_{(-i_1,-j_1)} = A - \mathbf{C}_{j_1}\mathbf{R}_{i_1},\\
A_{(-i_1,-j_1)}(i_1, :) = 0,\ \ A_{(-i_1,-j_1)}(:, j_1) = 0,\\
i_1 \in \{1, 2, ..., n\},\ \ j_1 \in \{1, 2, ..., n\};\\
A_{(-i_2,-j_2)} = A_{(-i_1,-j_1)} - \mathbf{C}_{j_2}\mathbf{R}_{i_2},\\
A_{(-i_2,-j_2)}(i_2, :) = 0,\ \ A_{(-i_2,-j_2)}(:, j_2) = 0,\\
i_2 \in \{1, 2, ..., n\},\ \ i_2 \ne i_1,\ \ j_2 \in \{1, 2, ..., n\},\ \ j_2 \ne j_1;\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
A_{(-i_n,-j_n)} = A_{(-i_{n-1},-j_{n-1})} - \mathbf{C}_{j_n}\mathbf{R}_{i_n} = 0,\\
i_n \in \{1, 2, ..., n\},\ \ i_n \notin \{i_k \mid k = 1, 2, ..., n-1\},\\
j_n \in \{1, 2, ..., n\},\ \ j_n \notin \{j_k \mid k = 1, 2, ..., n-1\}.
\end{gathered}
\tag{1}
$$

Например, в результате разложения 6×6 матрицы A относительно второй строки ($i_1 = 2$) и четвертого столбца ($j_1 = 4$) получаем

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

$$
- \begin{vmatrix} c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{54} & c_{64} \end{vmatrix}^T \begin{vmatrix} r_{21} & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} & r_{26} \end{vmatrix} =
$$

$$
= \begin{vmatrix}
a_{11} - c_{14}r_{21} & a_{12} - c_{14}r_{22} & a_{13} - c_{14}r_{23} & 0 & a_{15} - c_{14}r_{25} & a_{16} - c_{14}r_{26}\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
a_{31} - c_{34}r_{21} & a_{32} - c_{34}r_{22} & a_{33} - c_{34}r_{23} & 0 & a_{35} - c_{34}r_{25} & a_{36} - c_{34}r_{26}\\
a_{41} - c_{44}r_{21} & a_{42} - c_{44}r_{22} & a_{43} - c_{44}r_{23} & 0 & a_{45} - c_{44}r_{25} & a_{46} - c_{44}r_{26}\\
a_{51} - c_{54}r_{21} & a_{52} - c_{54}r_{22} & a_{53} - c_{54}r_{23} & 0 & a_{55} - c_{54}r_{25} & a_{56} - c_{54}r_{26}\\
a_{61} - c_{64}r_{21} & a_{62} - c_{64}r_{22} & a_{63} - c_{64}r_{23} & 0 & a_{65} - c_{64}r_{25} & a_{66} - c_{64}r_{26}
\end{vmatrix},
$$

где элементы $\{c_{i4} \mid i = 1, 2, ..., 6\}$ и $\{r_{2j} \mid j = 1, 2, ..., 6\}$ столбца $\mathbf{C}_4$ и строки $\mathbf{R}_2$ легко определяем по соответствующим элементам исходной матрицы A, при этом элементы c_{24} и r_{24}, удовлетворяющие равенству $c_{24}r_{24}=a_{24}$, находим, предполагая, что $c_{24}=1$, и тогда $r_{24}=a_{24}$ либо $r_{24}=1$, тогда $c_{24}=a_{24}$.

Поскольку в формируемых матрицах $A_{(-i_k,-j_k)}$ столбцы j_k и строки i_k становятся нулевыми, итоговая матрица имеет вид $A_{(-i_n,-j_n)}\equiv 0$. Из соотношений (1) следует равенство

$$A=\sum_{k=1}^{n}\mathbf{C}_{j_k}\mathbf{R}_{i_k}=CR, \tag{2}$$

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

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 $L=C$ и $U=R$. Если в соотношения (1), (2) ввести групповые индексы $\{i_k\}$ и $\{j_k\}$, а также соответствующие им блочные строки $|\{\mathbf{R}_{i_k}\}|^T$ и столбцы $|\{\mathbf{C}_{j_k}\}|$, 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 $|\mathbf{R}_k,\mathbf{R}_{n-k+1}|^T$ и столбцы $|\mathbf{C}_k,\mathbf{C}_{n-k+1}|$. Введение в (1), (2) групповых индексов переменной структуры $\operatorname{var}\{i_k\}$ и $\operatorname{var}\{j_k\}$, позволяет определить метод факторизации не только с фиксированными, но и с переменными размерами блочных строк $|\operatorname{var}\{\mathbf{R}_{i_k}\}|^T$ и столбцов $|\operatorname{var}\{\mathbf{C}_{j_k}\}|$.

Основное преимущество метода CR-факторизации над существующими методами заключается в адаптивности соотношений (1), (2) к позиционированию выбираемых ведущих элементов. Следует заметить, 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 сокращению объема вычислений приблизительно на 1/3 [1].

Однако применение метода CR-факторизации, как и других методов разложения разреженных матриц на множители, сопровождается непредсказуемым увеличением числа ненулевых элементов в факторных матрицах C и R относительно их числа в исходной матрице 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 $A=\widetilde{A}+\Delta=\widetilde{C}\widetilde{R}+\Delta$ с ошибкой Δ.

Факторизованные матрицы-предобусловлеватели $\widetilde{A}$ используются в итерационных методах проекций решений на подпространства Крылова для ускорения сходимости последовательности решений к точному решению систем алгебраических уравнений вида $AX = B$ [3].

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

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

$$P\langle\widetilde{C}\rangle \subset P\langle A\rangle \text{ и } P\langle\widetilde{R}\rangle \subset P\langle A\rangle;$$

$$\forall(i, j) \in P\langle A\rangle : [\widetilde{C}\,\widetilde{R}]_{ij} = [A]_{ij};$$

$$P\langle A\rangle \bigcap P\langle\Delta\rangle = 0.$$

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

Более сложен в реализации подход, основанный на различных оценках значимости ненулевых элементов факторных матриц L и U, что позволяет ограничить влияние отбрасываемых элементов на проникновение ошибок в матрицу-предусловливатель вида $A \approx \widetilde{L}\,\widetilde{U}$.

В современных методах неполной LU-факторизации таких, как $ILUT$ [3], $ILUC$ [4], $RIF - Ns$ [5], $AINV$ [6], построение предусловливателей основано на разложении вида $\widetilde{A} \approx \widetilde{L}\,D\,\widetilde{U}$, содержащем диагональную матрицу D. В процессе факторизации пренебрегают ненулевыми элементами l_{jk} и u_{kj} матриц L и U, значения которых удовлетворяют условиям

$$|l_{jk}|\,\|\mathbf{e}_k^T L^{-1}\| \leq \tau, \quad |u_{kj}|\,\|U^{-1}\mathbf{e}_k\| \leq \tau, \tag{3}$$

где τ — априори задаваемый приемлемый уровень потерь; $\mathbf{e}_k$ — вектор с единичным k-м элементом. Выполняемая при уменьшающихся значениях τ $ILU(\tau)$-факторизация матрицы $\widetilde{A} \approx \widetilde{L}\, D\, \widetilde{U} + \Delta$ позволяет уменьшить ошибку Δ до приемлемого уровня, а в предельном случае $\tau = 0$ получить $\Delta = 0$, т.е. выполнить факторизацию в полном объеме. Однако при таком способе регулирования ошибки Δ наблюдается существенное возрастание числа ненулевых элементов в матрицах $\widetilde{L}$ и $\widetilde{U}$, а шаблон $P\langle \widetilde{L} + \widetilde{U} \rangle$ становится отличным от шаблона $P\langle A \rangle$. Поэтому $ILU(\tau)$-факторизация, как правило, дополняется условием, ограничивающим заполненность матриц $\widetilde{L}$ и $\widetilde{U}$ ненулевыми элементами в таком количестве $nz\,(\widetilde{L} + \widetilde{U})$, что

$$\frac{nz\,(\widetilde{L} + \widetilde{U})}{nz(A)} \le \gamma. \tag{4}$$

Априори задаваемое значение параметра γ фактически устанавливает границы заполненности факторных матриц ненулевыми элементами, наибольшими из неудовлетворяющих условию (3). Таким образом, выполняемая $ILU(\tau, \gamma)$-факторизация обеспечивает возможность построения предусловливателя $\widetilde{A} \approx \widetilde{L}\, D\, \widetilde{U}$ матрицы 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 $\| \mathbf{e}_k^T L^{-1} \|$ и $\| U^{-1} \mathbf{e}_k \|$, входящих в условия (3). Из последовательно формируемых столбцов и строк матриц $\widetilde{L}$ и $\widetilde{U}$ непосредственно получить такую оценку не представляется возможным. Поэтому $ILU(\tau, \gamma)$-факторизация матрицы $\widetilde{A} \approx \widetilde{L}\, D\, \widetilde{U}$ совмещается с $AINV\,(\tau, \gamma)$-факторизацией обратной матрицы $A^{-1} = ZD^{-1}W$, выполняемой в неполном виде: $\widetilde{A}^{-1} = \widetilde{Z}D^{-1}\widetilde{W}$, где Z и W — верхне- и нижнетреугольная матрицы, а $\widetilde{Z}$ и $\widetilde{W}$ — аппроксимирующие их матрицы [6].

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

Кроме того, алгоритмы неполной факторизации несимметричных матриц не всегда могут обеспечить приемлемую аппроксимацию факторных матриц в ограниченной оперативной памяти без предварительного упорядочения строк и столбцов исходной матрицы A. Поскольку такое упорядочение не учитывает условий вычислительной устойчивости процесса факторизации, неполная факторизация упорядоченных матриц осуществляется в условиях контроля за близостью ведущих элементов к машинному нулю. Ведущие элементы, значения которых не превышают машинный нуль, искусственно корректируются, для того 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 предусловливатели часто оказываются непригодными для итерационного решения линейных систем алгебраических уравнений с особенностями.

Таким образом, современные методы неполной факторизации матриц имеют два существенных недостатка: отсутствие процедуры выбора ведущих элементов для обеспечения вычислительной устойчивости алгоритма и значительно завышенные требования к использованию ресурсов оперативной памяти. Таких недостатков лишен предлагаемый метод *ICR*-факторизации.

Устойчивость метода *CR*-факторизации матриц. Анализ соотношений вида (1) свидетельствует об итерационном характере формул *CR*-факторизации матриц с числом итераций n. Для матриц большой размерности такая цепь вычислений может приводить к существенному накоплению ошибок. Чтобы обеспечить устойчивость вычислительного процесса, следует на каждом шаге факторизации выбирать ведущий элемент, позволяющий минимизировать влияние произведения $\mathbf{C}_{j_k}\mathbf{R}_{i_k}$ на субматрицу $A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$, из которой образуется субматрица $A_{(-i_k,-j_k)}$. Для этого поиск ведущего элемента $a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j_k)$ в субматрице $A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$ необходимо осуществлять в соответствии с требованием получения таких множителей $\mathbf{C}_{j_k}$ и $\mathbf{R}_{i_k}$, которые имеют минимально возможную норму:

$$\| A_{(-i_k,-j_k)} - A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})} \| = \| \mathbf{C}_{j_k}\mathbf{R}_{i_k} \| \le \| \mathbf{C}_{j_k} \| \| \mathbf{R}_{i_k} \| \to \min_{(i_k,j_k)}. \tag{5}$$

Здесь и ниже символом $\| \ \|$ обозначена октаэдральная норма. Выбор именно такой нормы объясняется простотой алгоритма ее вычисления, а главное, устойчивостью получаемых результатов к вычислительным ошибкам. Поскольку

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

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

$a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j_k) = c_{i_k j_k} r_{i_k j_k}$, а также столбец j_k и строка i_k субматрицы $A_{(-i_k,-j_k)}$ являются нулевыми, из (5), с учетом (1), находим уточненное выражение:

$$[\|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,*)\| - |a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j_k)|] \times$$
$$\times \frac{[\|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(*, j_k)\| - |a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j_k)|]}{|a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j_k)|} \to \min_{(i_k, j_k)}, \tag{8}$$

где

$$\|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(*, j_k)\| = \sum_i |a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i, j_k)|,$$
$$\|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k,*)\| = \sum_j |a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j)|.$$

Критерий (8) легко реализуем, поскольку нахождение входящих в него норм осуществляется рекуррентно и не требует значительных вычислительных затрат. Кроме того, для поиска ведущего элемента $a_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i_k, j_k)$ нет необходимости выполнять оценки функционала в выражении (8) для всех элементов субматрицы $A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$. Поиск ведущего элемента достаточно осуществить в $n_k << n$ ненулевых строках субматрицы $A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$, содержащих наименьшее число ненулевых элементов. Такой способ поиска ведущего элемента не только обеспечивает устойчивость вычислений, но и уменьшает различие между шаблонами субматриц $A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$ и $A_{(-i_k,-j_k)}$.

Анализируя выражения (5) и (8), замечаем, что предельное (нулевое) значение функционала в (8) достигается при условии, что ведущий элемент выбирается на пересечении строки и столбца, когда в одном из них имеется только один элемент, отличный от нуля. В этом случае при переходе от субматрицы $A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}$ к субматрице $A_{(-i_k,-j_k)}$ ошибок не возникает. В остальных случаях возможны ошибки в компьютерных вычислениях, однако их число ограничено тем больше, чем меньше 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

$$|c_{ij_k}| \|\mathbf{R}_{i_k}\| << \|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(i,*)\| \tag{9}$$

и

$$|r_{i_k j}| \|\mathbf{C}_{j_k}\| << \|A_{(-i_{k-1},-j_{k-1})}(*, j)\|, \tag{10}$$

элементы c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ оказываются несущественными и можно полагать, что они равны нулю.

Для оценки значимости элементов c_{ij_k} и $r_{i_k j}$ нет необходимости в предварительном вычислении столбца $\mathbf{C}_{j_k}$ и строки $\mathbf{R}_{i_k}$, так как выражения (9) и (10), с учетом (6) и (7), можно представить в тождественном виде:

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

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

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

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

и

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

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 $\widetilde{\mathbf{C}}_{j_k}$ и строках $\widetilde{\mathbf{R}}_{i_k}$.

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) при выборе ведущих элементов в соответствии с критерием (8) и пренебрежении элементами факторных матриц, удовлетворяющих условиям (13), (14), называется методом неполной столбцово-строчной факторизации матриц, или 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-хразрядных 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 от 10^{-1} до 10^{-4}, что достаточно для построения эффективных предусловливателей.

Результаты экспериментальных исследований. Тестирование предложенного метода выполнено на примерах несимметричных матриц [5], основные характеристики которых приведены в табл. 1, где указаны также наименования тестовых матриц, по которым их можно найти в интернете,

Таблица 1

Название матрицы в интернете	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

Тип компьютера	IBM System x3850	Desktop Computer
Процессор:		
разрядность	64-bit	32-bit
SMP, шт.	4	1
тип	Intel Xeon MP	Intel Pentium 4
частота	3.66 GHz	3.0 GHz
частота шины	667 MHz	800 MHz
объем кэш-памяти L2	1 MB	1 MB
Память:	DDR2 dual	DDR dual
объем	16 GB	1 GB
скорость доступа	400 MHz	400 MHz
Операционная система	Неизвестна	Microsoft Windows XP
Компилятор:		
язык	Fortran-90	C++
тип	Intel Compiler ifort	Microsoft Visual Studio 2008
параметр оптимизации	O4	Full

Таблица 3

Название матрицы в интернете	ICR	left-RIF	right-RIF	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

размерности матриц n и число содержащихся в них ненулевых элементов nz. Все расчеты выполнены на вычислительном устройстве Desktop Computer, параметры которого, а также характеристики использованого программного обеспечения представлены в табл. 2. Для сравнения в табл. 2 приведены также характеристики вычислительного устройства IBM System x3850 и программного обеспечения, использованных в работе [5] для факторизации тех же тестовых матриц.

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

В табл. 3 приведено число итераций метода GMRES(30) с различными предобусловливателями. Как видно из табл. 3, результаты экспериментов свидетельствуют о подобности аппроксимационных свойств предобусловливателей, полученных методами *ICR*-, *left-RIF–Ns*-, *right-RIF–Ns*-, *AINV*-, *ILUC*-факторизации, несмотря на то что *ICR*-факторизация матриц осуществлялась без выполнения условия (4) для отсечения элементов матриц $\widetilde{C}$ и $\widetilde{R}$.

В большинстве тестов затраты времени на факторизацию оказались сопоставимыми. Преимущества метода *ICR*-факторизации весьма существенны для матриц dc3, trans4, trans5, к которым известные методы факторизации применялись без использования процедур предварительного упорядочения матричных строк и столбцов. Преимущество заключается в многократном (в 2—3 раза) ускорении сходимости итерационных процедур в случае использования *ICR*-предобусловливателя.

Выводы. Предложенный метод неполной столбцово-строчной факторизации несимметричных матриц отличается от известных методов *ILU*-, *AINV*- и *RIF–Ns*-факторизации отсутствием дополнительных требований к используемым ресурсам памяти, кроме необходимых для размещения факторных матриц. Вычислительная устойчивость метода обеспечивается применением оригинальной процедуры поиска ведущих элементов в субматрицах. Поиск выполняется в ограниченном множестве строк с наименьшим числом ненулевых элементов.

Новый метод содержит оригинальную процедуру выбора ведущих элементов, что обеспечивает устойчивость вычислений к ошибкам округления и ошибкам отсечения малозначимых элементов.

Преимущества предложеного метода *IRC*-факторизации над методом *ILU*-факторизации и его модификациями заключается в достижении высокой аппроксимационной точности формируемых факторных матриц при экономичном использовании ресурсов памяти, что подтверждается экспериментально на множестве тестовых примеров при использовании матриц $\widetilde{C}$ и $\widetilde{R}$ в качестве предобусловливателей в итерационных методах Крылова типа GMRES(m) и BiCGStab.

A method of the column-line (ICR) factorization of asymmetrical matrices is proposed for forming predeterminers. The method does not require permutation of lines and columns in submatrices. The obtained factor matrices are not triangular. The original procedure of the search for the leading element in the submatrix by the criterion of minimum of divergence by the Frobenius norm between the transformable and transformed submatrices provides for the stability of calculations for badly determined matrices. An original estimation of the value of the factor matrices elements is used in the method of ICR-factorization. The examples of solution for the test equation systems with the use of iterational methods of solution projections to Krylov's subspaces are presented which confirm the advantages of the proposed method.

1. *Саух С. Е.* Метод *CR*-факторизации матриц большой размерности // Электрон. моделирование. — 2007. — **29**, № 6. — 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. — Minneapolis: University of Minnesota MN, 2000. — 448 p.
4. *Li N., Saad Y., Chow E.* Crout Versions of ILU for General Sparse Matrices // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2003. — Vol. 25. —- P. 716—728.
5. *Rafiei A., Bollhufer M.* Robust Incomplete Factorization for Nonsymmetric Matrices. — http://www.math.tu-berlin.de/numerik/mt/NumMat/Publikationen/search.html
6. *Benzi M., Tuma M.* A Sparse Approximate Inverse Preconditioner for Nonsymmetric Linear Systems // SIAM Journal on Scientific Computing. — 1998. — Vol. 19. — P. 968—994.
7. *Эстербю О., Златев З.* Прямые методы для разреженных матриц. — М. : Мир, 1987. — 120 с.

Поступила 10.09.10

САУХ Сергей Евгеньевич, д-р техн. наук, гл. науч. сотр. Ин-та проблем моделирования в энергетике им. Г. Е. Пухова НАН Украины. В 1978 г. окончил Киевский ин-т инженеров гражданской авиации. Область научных исследований — численные операторные методы решения дифференциальных уравнений, декомпозиционные и итерационные методы решения линейных систем большой размерности, математическое моделирование технологических процессов в энергетике и газотранспортных системах, экономико-математические методы моделирования финансовых и макроэкономических процессов.