Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского

Факультет Вычислительной математики и кибернетики

Параллельные численные методы

Предобуславливание

При поддержке компании Intel

Баркалов К.А.,
Кафедра математического обеспечения ЭВМ

Содержание

- Постановка задачи
  - Понятие предобуславливания
  - Требования к предобуславливателям
  - Виды предобуславливания
- Базовые предобуславливатели
  - Якоби (J), Гаусса-Зейделя (GS)
  - SOR, SSOR, SGS
- Неполное LU-разложение
  - Общая схема
  - ILU(0), разложение без заполнения
  - ILU(p), разложение с контролем заполнения
- Результаты экспериментов

Постановка задачи

- Рассмотрим систему из n линейных алгебраических уравнений вида

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 &+ a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\
a_{21}x_1 &+ a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\
\ldots \\
a_{n1}x_1 &+ a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n
\end{aligned}
$$

- В матричном виде система может быть представлена как

$$Ax=b$$

- $A=(a_{ij})$ есть вещественная матрица размера $n\times n$; A – разреженная матрица; b и x – вектора из n элементов; точное решение системы обозначим x^*.
- *Итерационный метод* генерирует последовательность векторов $x^{(s)}\in R^m$, $s=0,1,2,\ldots$, где $x^{(s)}$ – приближенное решение системы.

Сходимость итерационных методов

- Итерационный метод называется сходящимся, если

$$\forall\ x^{(0)} \in R^m \quad \lim_{s\to\infty} \left\| x^{(s)} - x^* \right\| = 0$$

- Для итерационных методов обычно справедлива оценка

$$\left\| z^{(s+1)} \right\| \le \left(\varphi(\mu_A) \right)^s \left\| z^{(0)} \right\|$$

где $z^{(s)}=x^{(s)}-x^*$ – погрешность очередного приближения,

φ – некоторая функция, $\varphi\to 0$ при $s\to\infty$.

$\mu_A=\lambda_{max}/\lambda_{min}$ – спектральное число обусловленности.

Например, для метода сопряженных градиентов

$$\varphi(\mu_A) = \frac{\sqrt{\mu_A} - 1}{\sqrt{\mu_A} + 1}$$

Идея предобуславливания

- $\mu_A \approx 1$ – метод сходится быстро (A – хорошо обусловлена)
- $\mu_A >> 1$ – метод сходится медленно (A – плохо обусловлена)
- Идея предобуславливания – перейти от плохо обусловленной системы

$$Ax=b$$

к хорошо обусловленной

$$M^{-1}Ax=M^{-1}b.$$

Здесь M – предобуславливатель.

- $M^{-1}A$ – не вычисляется явно, т.к. $M^{-1}A$ будет, скорее всего, плотной матрицей
- В итерационный метод добавляются корректирующие шаги, учитывающие предобуславливание.

Требования к предобуславливателю

1. M должна быть близкой к A ($M^{-1}A$ – хорошо обусловлена)
2. M должна легко вычисляться;
3. M должна допускать быстрое решение систем вида

$$Mz=r$$

относительно неизвестного вектора z.

Пример 1.

Пусть $M=A$. Тогда выполнены п.1 и п.2.

п.3 – не выполнен $Az=r$ – та же задача, что исходная

Пример 2.

Пусть $M=\mathrm{diag}(A)$. Тогда выполнены п.2 и п.3.

п.1 – может не выполняться

Виды предобуславливания

$Ax=b$ – исходная система

1. Левое предобуславливание
   $M^{-1}Ax=M^{-1}b$.
2. Правое предобуславливание
   $AM^{-1}u=b$, где $x=M^{-1}u$.
3. Расщепленное предобуславливание.
   Представляем предобуславливатель в виде $M = M_L M_R$
   Тогда
   $M_L^{-1} A M_R^{-1} u = M_L^{-1} b$, где $x = M_R^{-1} u$

Базовые предобуславливатели

- Вспомним базовые итерационные методы – Якоби, Зейделя, верхней релаксации (SOR и SSOR)
- Все они являются частными случаями метода простой итерации

$$x^{(s+1)} = Gx^{(s)} + c$$

где A=M–N, а $G = M^{-1}N = M^{-1}(M - A) = E - M^{-1}A$

- Метод (∗) – МПИ для системы

$$(E - G)x = c$$

которая может быть записана как

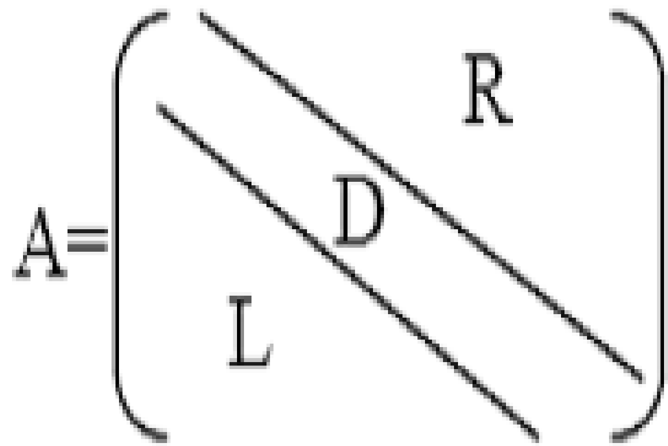
$$M^{-1}Ax = M^{-1}b$$

- Итог: методы Якоби, Зейделя, SOR, SSOR эквивалентны МПИ с предобуславливателем.

Базовые предобуславливатели

Таким образом, получаем следующие предобуславливатели:

1. $M_J = D$ (Якоби)
   можно явно применить к системе - домножить на D^{-1}.
2. $M_{GS} = D + L$ (Гаусса-Зейделя)
3. $M_{SOR} = \frac{1}{\omega}(D + \omega L)$
4. $M_{SSOR} = \frac{1}{\omega(2-\omega)}(D + \omega L)D^{-1}(D + \omega R)$



SSOR-предобуславливание

- Как выбирать параметр ω?
- Для предобуславливателя выбор параметра не оказывает столь критичное влияние, что и для метода SSOR: ω=1
- Симметричный предобуславливатель Гаусса-Зейделя

$$M_{SGS} = (D+L)D^{-1}(D+R)$$

- Применение предобуславливателя, т.е. решение системы

$$M_{SGS}z = r$$

имеет такую же трудоемкость, что и произведение матрицы на вектор.

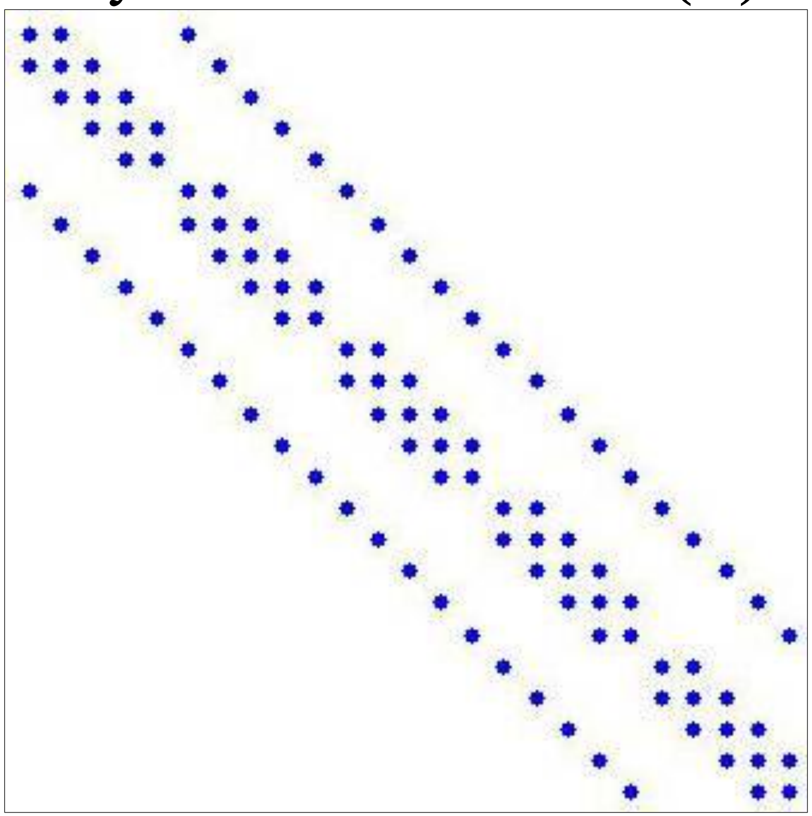
- В целом M_{SGS} лучше, чем M_J, но недостаточно хорошо.

SGS-предобуславливание – пример

Численное решение уравнения Пуассона на сетке 5×5

Матрица A : размер n=25 (n^2 = 625), число ненулей nz = 105,

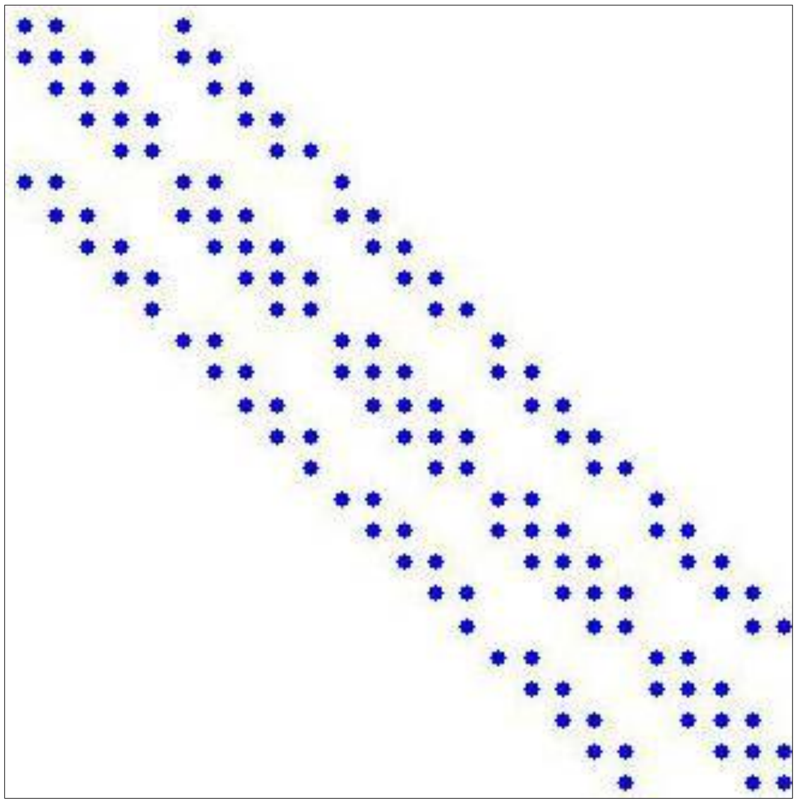
число обусловленности cond(A)= 20.7



SGS-предобуславливание – пример

Симметричный предобуславливатель Гаусса-Зейделя

$$M_{SGS} = (D+L)D^{-1}(D+R)$$



Исходная система: cond(A)=20.7;
M_{SGS}: cond($M^{-1}A$)=5.1.

Уравнение Пуассона на сетке 40×40
Размер матрицы 1600×1600.

Исходная система: cond(A)=989;
M_{SGS}: cond($M^{-1}A$)=210.

ILU(0)-предобуславливание

- Пусть A – разреженная матрица
  $NZ(A)=\{(i,j): a_{ij}\neq 0\}$
- Пусть найдено разложение A в форме

$$A=LU-R$$

  L и U – нижняя (с единичной диагональю) и верхняя треугольные матрицы;

  $NZ(L) \cup NZ(U) = NZ(A)$;

  $r_{ij} = 0$ для всех $(i,j) \in NZ(A)$.

  Тогда ILU(0)-предобуславливатель $M=LU\approx A$.
- Указанные требования не определяют ILU(0) однозначно.

ILU(0)-предобуславливание

- Конструктивное определение ILU(0) : Выполнить LU-факторизацию A, но при этом обнулять все элементы заполнения в L и U вне $NZ(A)$.
- LU-факторизация (метод исключения Гаусса)

for i=2,…, n do

  for k=1,…, i–1 do

    $a_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$

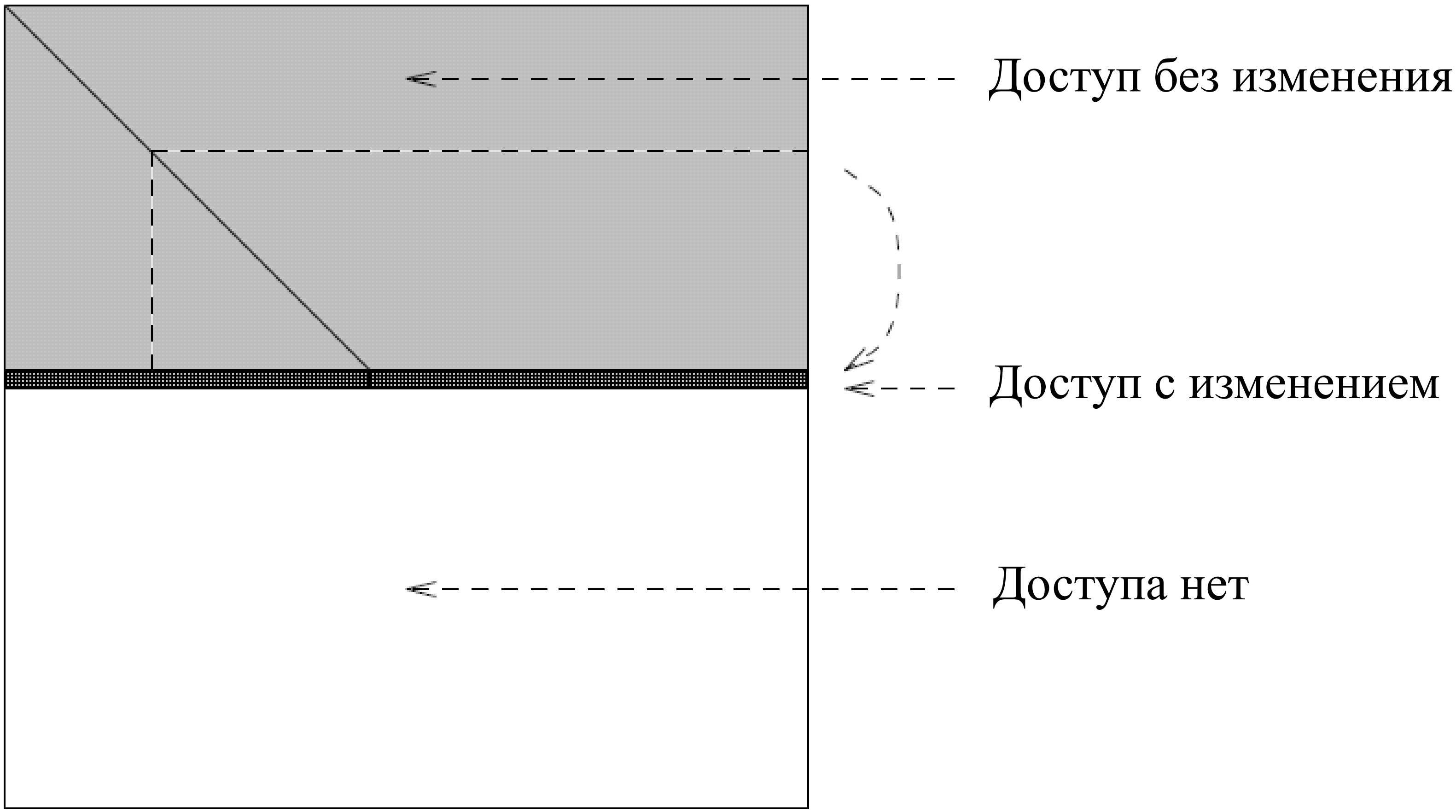
    for j=k+1,…, n do

    $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik}*a_{kj}$

  end i

end k

Состояние памяти



Доступ к строкам матрицы – эффективно для разреженных матриц в CRS-формате

ILU(0)-разложение – алгоритм

for i=2,…, n do

    for k=1,…, i–1 and if $(i,k) \in NZ(A)$ do

        $a_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$

        for j=k+1,…, n and if $(i,j) \in NZ(A)$ do

        $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} * a_{kj}$

    end i

end k

- Если матрица A – симметричная положительно определенная, то $ILU(0)$ превращается в $IC(0)$ – неполное разложение Холецкого.

ILU(0)-разложение – пример 1

Рассмотрим факторизацию матрицы A

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

Проведем полное LU-разложение

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -0.25 & 1 & & \\ -0.25 & -0.067 & 1 & \\ 0 & -0.0267 & -0.286 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ & 3.75 & -0.25 & -1 \\ & & 3.733 & -1.067 \\ & & & 3.429 \end{bmatrix}$$

ILU(0)-разложение – пример 1

Неполное разложение $A \approx IL * IU$

$$IL = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -0.25 & 1 & & \\ -0.25 & 0 & 1 & \\ 0 & -0.267 & -0.267 & 1 \end{bmatrix} \qquad IU = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ & 3.75 & 0 & -1 \\ & & 3.75 & -1 \\ & & & 3.467 \end{bmatrix}$$

Невязка неполного разложения

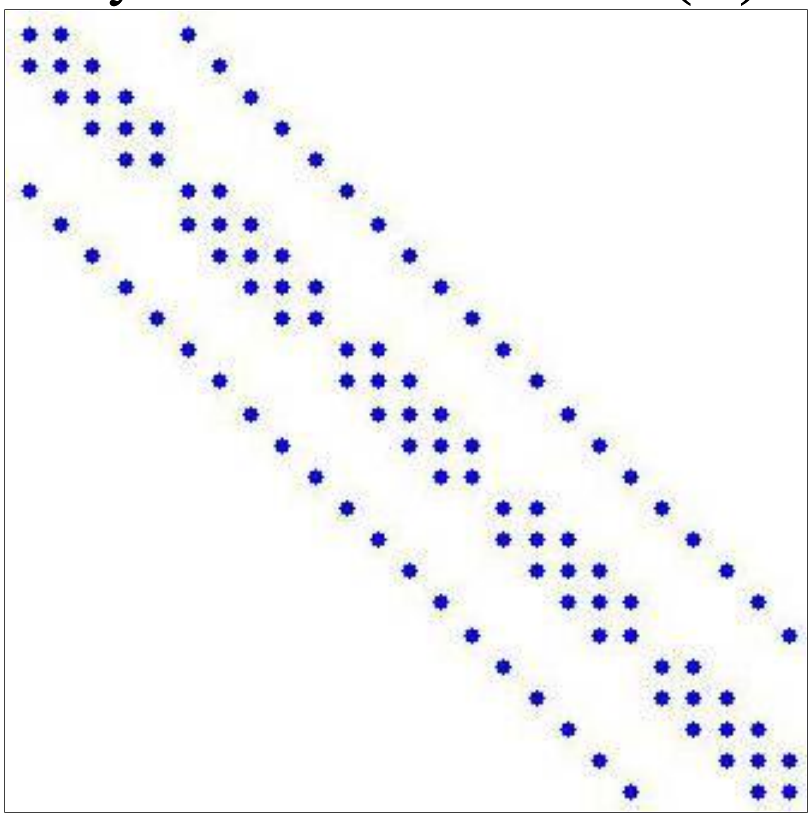
$$A - IL * IU = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.25 & 0 \\ 0 & -0.25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

ILU(0)-разложение – пример 2

Численное решение уравнения Пуассона на сетке 5×5

Матрица A : размер n=25 (n^2 = 625), число ненулей nz = 105,

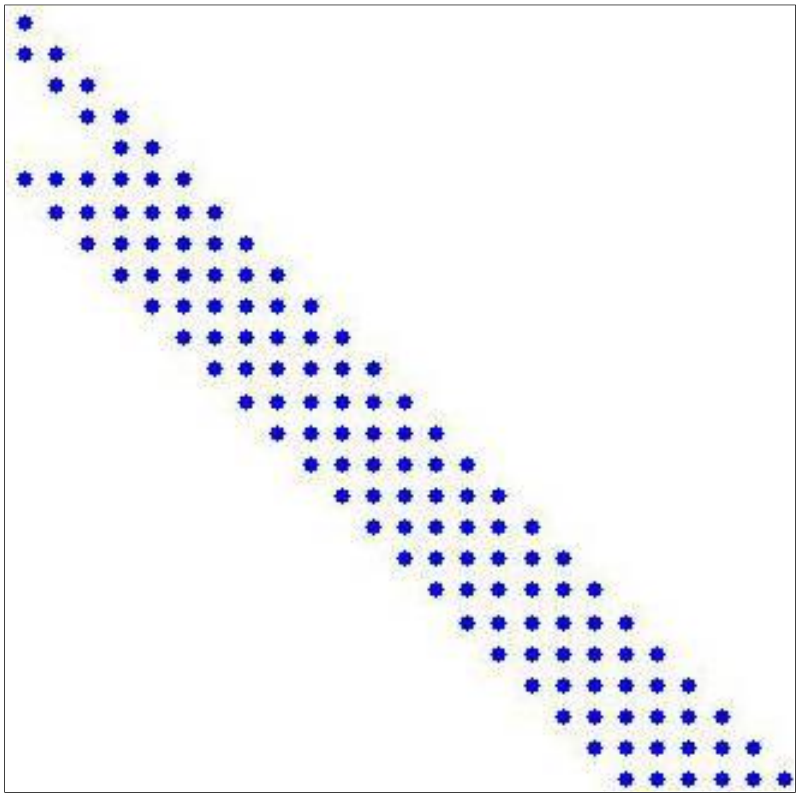
число обусловленности cond(A)= 20.7

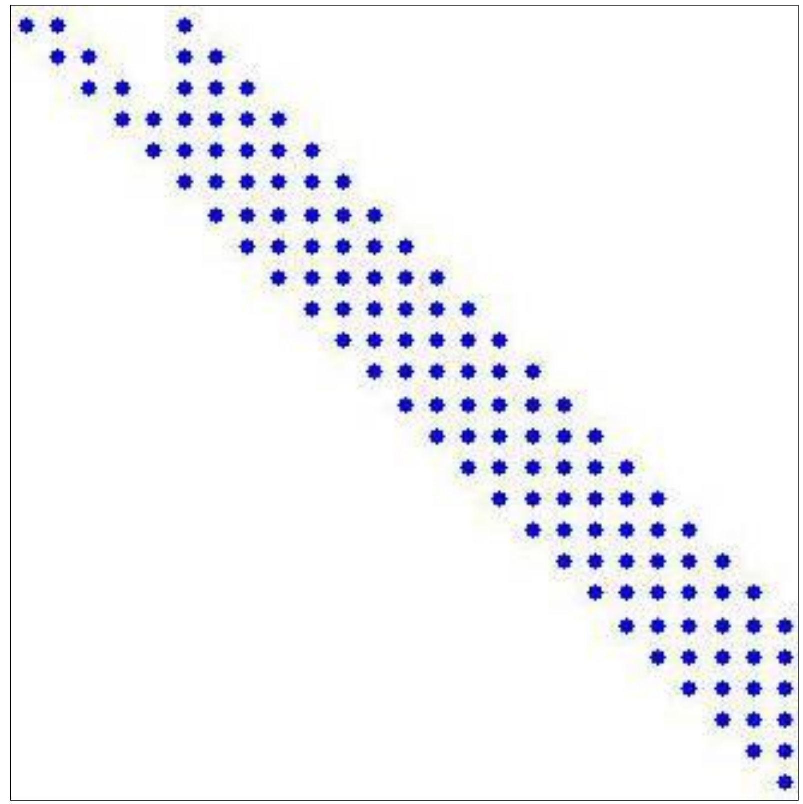


ILU(0)-разложение – пример 2

Проведем полное LU-разложение $A=LU$

L U

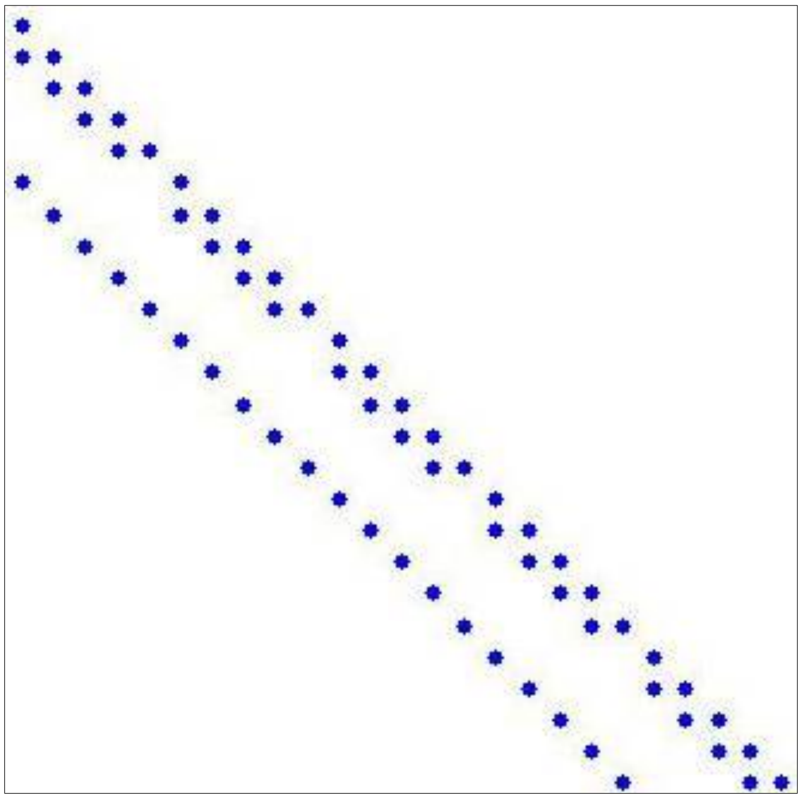


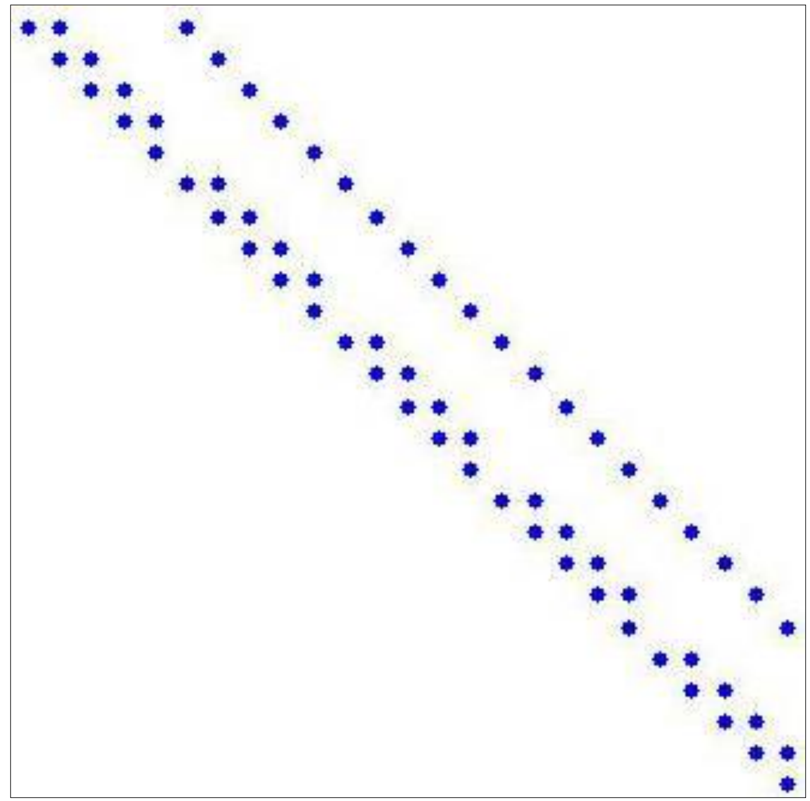


ILU(0)-разложение – пример 2

Проведем *ILU(0)*-разложение $A \approx IL*IU$

IL *IU*

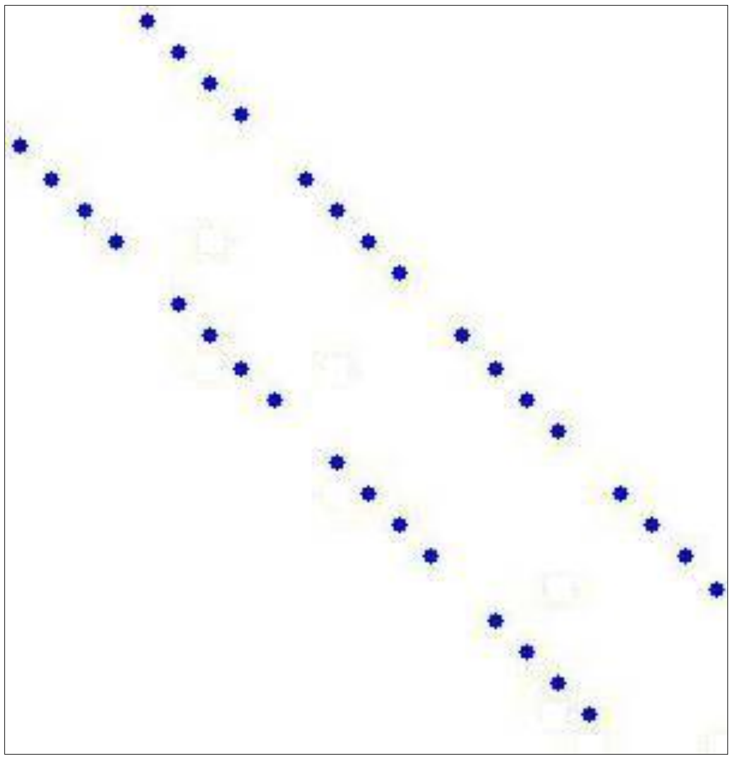




ILU(0)-разложение – пример 2

Невязка *ILU(0)*-разложения

$A – IL * IU$



Исходная система: cond(A)=20.7;
M_{SGS}: cond($M^{-1}A$)=5.1.
$M_{ILU(0)}$: cond($M^{-1}A$)=3.6.

Уравнение Пуассона на сетке 40×40
Размер матрицы 1600×1600.

Исходная система: cond(A)=989;
M_{SGS}: cond($M^{-1}A$)=210.
$M_{ILU(0)}$: cond($M^{-1}A$)=143.

Контроль заполнения. ILU(p)-разложение

- Более точное ILU-разложение можно получить, «разрешив» некоторое заполнение факторов
  - для матриц с регулярной структурой – можно заполнить *p* дополнительных диагоналей;
  - обобщение для матриц с нерегулярной структурой – через понятие *уровня заполнения.*
- Начальное значение уровня заполнения l_{ij}

$$l_{ij} = \begin{cases} 0, \text{ если } a_{ij} \neq 0 \text{ или } i = j, \\ \infty, \text{ иначе.} \end{cases}$$

- На *i*-м шаге гауссова исключения

$$l_{ij} = \min\{l_{ij}, l_{ik} + l_{kj} + 1\}$$

ILU(p)-разложение – алгоритм

- Стратегия ILU(p) – обнулить все элементы с уровнем заполнения, большим *p*.

for $i = 2,\ldots,n$ do

  for $k = 1, \ldots, i - 1$ and if $a_{ij} \neq 0$ do

    $a_{ik} = a_{ik} / a_{jj}$

    $a_{i*} = a_{i*} - a_{ik} * a_{i*}$

    обновить уровни заполнения для a_{i*}: $l_{ij} = \min\{l_{ij}, l_{ik} + l_{kj} + 1\}$

    для *i*-й строки: if $l_{ij} > p$ then $a_{ij} = 0$

  end *k*

end *i*

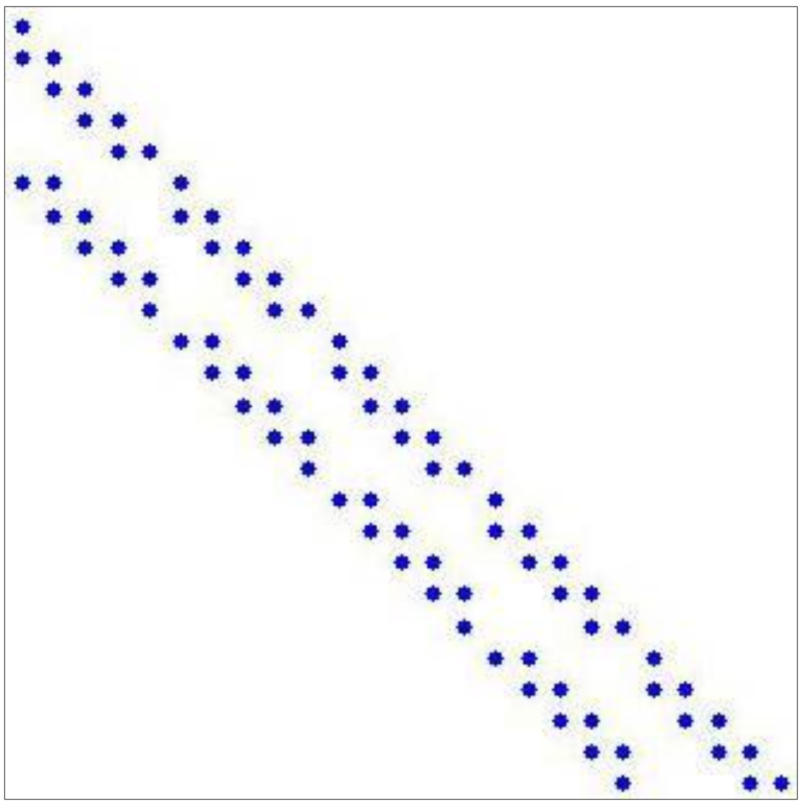
- Алгоритм можно разделить на символическую (портреты *L* и *U*) и численную (значения *L* и *U*) части

ILU(p)-разложение – пример

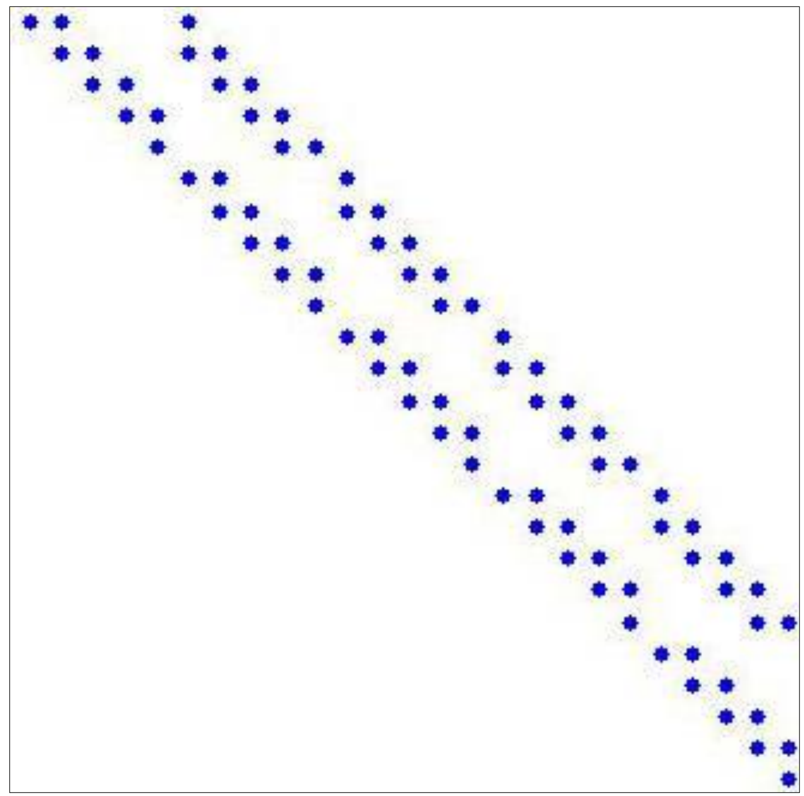
Численное решение уравнения Пуассона на сетке 5×5

Проведем *ILU(1)*-разложение $A \approx IL * IU$

IL



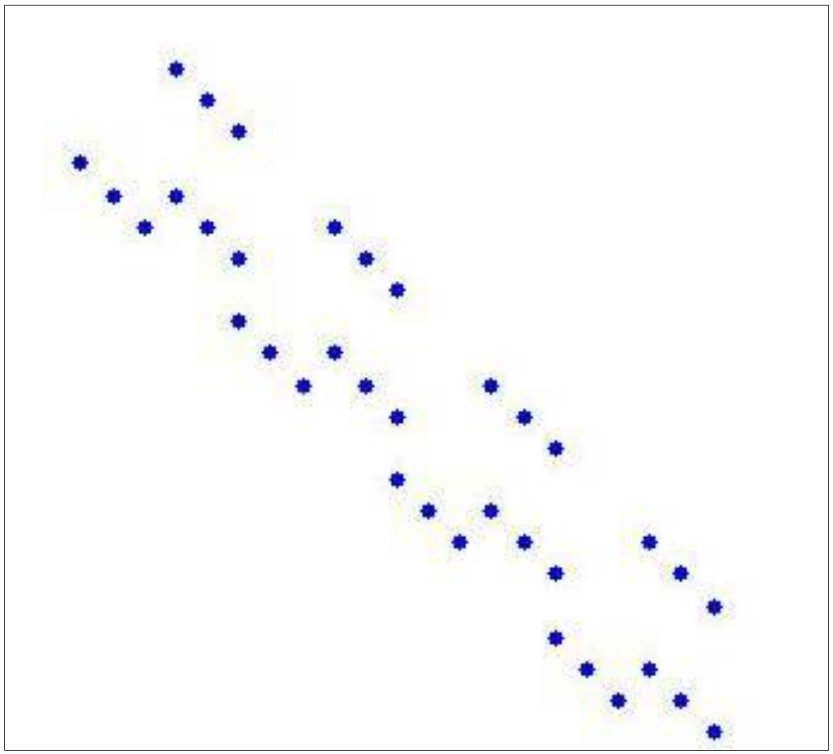
IU



ILU(p)-разложение – пример

Невязка *ILU(1)*-разложения

$A–IL*IU$



Исходная система: cond(A)=20.7;

M_{SGS}: cond($M^{-1}A$)=5.1.

$M_{ILU(0)}$: cond($M^{-1}A$)=3.6.

$M_{ILU(1)}$: cond($M^{-1}A$)=1.5.

Уравнение Пуассона на сетке 40×40

Размер матрицы 1600×1600.

Исходная система: cond(A)=989;

M_{SGS}: cond($M^{-1}A$)=210.

$M_{ILU(0)}$: cond($M^{-1}A$)=143.

$M_{ILU(0)}$: cond($M^{-1}A$)=54.

Заключение

- На лекции рассмотрено:
  - Понятие предобуславливания
  - Требования к предобуславливателям
  - Виды предобуславливания
  - Базовые предобуславливатели
    - Якоби (J), Гаусса-Зейделя (GS)
    - SOR, SSOR, SGS
  - Неполное LU-разложение
    - Общая схема
    - ILU(0), разложение без заполнения
    - ILU(p), разложение с контролем заполнения
  - Результаты экспериментов

Литература

1. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989.
2. Белов С.А., Золотых Н.Ю. Численные методы линейной алгебры. – Н.Новгород, Изд-во ННГУ, 2005.
3. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. – М.: Мир, 1999.
4. J. Dongarra et al. Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods. SIAM, 1994.
5. Y. Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. SIAM, 2003.

Ресурсы сети Интернет

5. Intel Math Kernel Library Reference Manual. [http://software.intel.com/sites/products/documentation/hpc/mkl/mklman.pdf].

Авторский коллектив

- Баркалов Константин Александрович,
  к.ф.-м.н., доцент кафедры
  математического обеспечения ЭВМ факультета ВМК ННГУ.
  barkalov@fup.unn.ru

- Коды учебных программ разработаны Козиновым Евгением