

УДК 004.4:512.64

А.В. Игнатьев, В.Н. Ромашкин

АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ БОЛЬШИХ РАЗРЕЖЕННЫХ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрены эффективные методы для решения больших разреженных систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при применении метода конечных элементов (МКЭ) к расчету строительных конструкций. Данная работа ограничена рассмотрением прямых методов решения для симметричных положительно определенных систем уравнений.

The authors study the efficient methods for the solution of large sparse systems of linear algebraic equations emerging when the Method of Finite Element (MFE) is applied to the analysis of engineering structures. The present paper doesn't come beyond the consideration of the direct solution methods for the symmetric positively defined systems of equations

Наличие эффективных графических препроцессоров и автоматических генераторов сеток в современных расчетных конечно-элементных программах, с одной стороны, и непрерывно возрастающие требования к детальности расчетных моделей, с другой, приводит к необходимости решать системы уравнений высокого порядка, достигающих для сложных моделей 100 000...500 000 уравнений и выше.

В основе эффективного метода (как прямого, так и итерационного) решения больших разреженных систем линейных уравнений лежит хранение и использование разреженных матриц, а также эффективных способов их предобработки.

Все методы и алгоритмы, обсуждаемые далее в статье, основаны на единственном численном алгоритме, известном как метод Холецкого, — симметричном варианте гауссова исключения.

При условии, что система уравнений является разреженной, считается неэффективным хранение и обработка всей матрицы. Можно значительно сэкономить память, уменьшить время решения поставленной задачи и тем самым уменьшить стоимость решения, если хранить и обрабатывать только ненулевые элементы.

Центральной проблемой при прямом решении разреженных симметричных СЛАУ является заполнение. Эффективность решения задачи прямым методом существенно зависит от того, насколько удастся уменьшить это заполнение — количество новых ненулевых элементов, появляющихся в матрице жесткости в результате факторизации.

Таким образом, возникает три задачи: 1) выбор надлежащего упорядочения; 2) формирование подходящей схемы хранения; 3) реальные вычисления. Эти задачи могут быть разделены как самостоятельные объекты исследования и разные модули программного обеспечения [1].

Рассмотрим наиболее эффективные алгоритмы для каждой из задач и проанализируем результаты их совместного применения.

Начнем исследование этих задач со второй, поскольку выбор того или иного метода упорядочивания зависит от схемы хранения и определенные методы упорядочения работают эффективно только для определенных схем хранения.

Существуют различные схемы хранения разреженных матриц, отличающиеся способом использования нулей. В некоторых случаях допускается хранение части нулей в обмен на упрощение схемы хранения; в других — используются все нули системы; в третьих — нули вообще не используются.

Выбор метода хранения, естественно, влияет на запросы к памяти и на использование стратегии упорядочения. Кроме того, он оказывает существенное воздействие на реализацию разложения и решения, а, следовательно, на сложность программ и время исполнения.

Наиболее распространенными являются ленточная и профильная схемы хранения разреженных матриц, а также разреженный строчный формат (CSR) [3].

В процессе построения множителей Холецкого разреженная матрица обычно претерпевает заполнение.

Для того чтобы появлялось как можно меньше новых ненулевых элементов, предложены различные способы нумерации переменных и переупорядочения уравнений, которые равносильны перестановке строк и столбцов исходной матрицы. К настоящему времени известно достаточно много об источниках возникновения заполнения, и для его уменьшения разработаны эффективные процедуры. Все они основаны на использовании свободы в выборе главных элементов, которые в случае положительно определенной матрицы A могут выбираться на диагонали в любом порядке [3].

Ленточные и профильные методы были специально сконструированы таким образом, что гауссово исключение может порождать новые ненулевые элементы лишь внутри ленты или профиля. Поэтому рассмотрим методы упорядочения, эффективные для матриц, записанных по ленточной или профильной схеме хранения, направленные на уменьшение ленты и/или профиля.

Для уменьшения ширины ленты существует ряд алгоритмов [2, 4], но наиболее распространенным и широко используемым, благодаря своей простоте является метод Катхилла — Макки.

В [5] было установлено, что упорядочение, получаемое обращением упорядочения Катхилла — Макки, часто гораздо сильнее уменьшает профиль, чем первоначальное упорядочение, хотя ширина ленты остается неизменной. Это упорядочение было названо обратным алгоритмом Катхилла — Макки (RCM). Позднее было доказано, что обратная схема всегда не хуже прямой в отношении хранения и обработки профиля [6].

Другими эффективными алгоритмами уменьшения профиля являются алгоритм Кинга [7] и алгоритм Слоана [8].

С матрицами, в которых нули вообще не хранятся, записанными в разреженном — строчном формате дела обстоят куда сложнее. Прежде чем начинать численный этап исключения, нужно убедиться, что в памяти есть место для новых элементов.

Определить их количество и положения в матрице нужно еще до того, как они будут вычислены. В этом случае наиболее широко используемыми в прикладных расчетах алгоритмами упорядочения являются алгоритм минимальной степени (MD) и алгоритм вложенных сечений (ND).

Выбрав наиболее эффективные алгоритмы хранения и упорядочения матриц, выявим наиболее эффективное их сочетание при решении систем разреженных алгебраических уравнений по методу Холецкого.

Для анализа эффективности использования различных сочетаний методов хранения и упорядочения матриц был проведен вычислительный эксперимент.

В тестовый набор были включены задачи расчета плоских регулярных стержневых систем.

Регулярная сетка размера 10×10 показана на рис. 1.

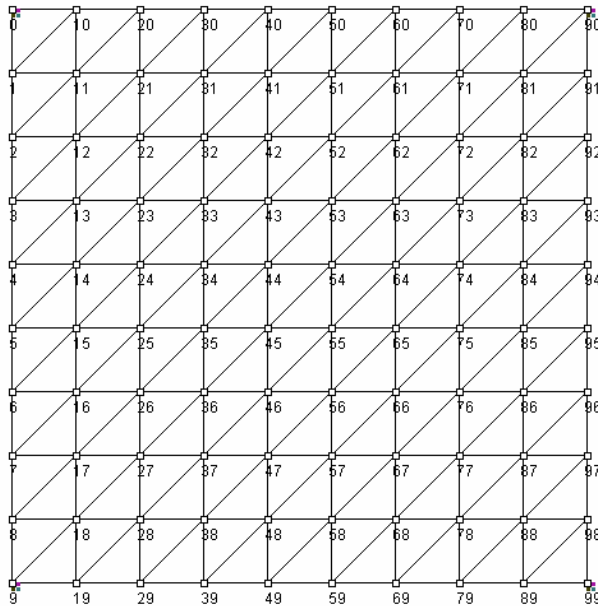


Рис. 1. Регулярная сетка размера 10×10

Описание используемого тестового набора представлено в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Тестовый набор

Размерность сеточной задачи	Количество узлов	Количество элементов	Порядок матрицы	Количество ненулевых элементов в верхнем треугольнике	Разреженность матрицы, %
10×10	100	261	300	2649	93.78
30×30	900	2581	2700	25929	99.25
50×50	2500	7301	7500	73209	99.73
70×70	4900	14421	14700	144489	99.86
100×100	10000	29601	30000	296409	99.93
150×150	22500	66901	67500	669609	99.97
200×200	40000	119201	120000	1192809	99.98
300×300	90000	268801	270000	2689209	99.99
400×400	160000	478401	480000	4785609	99.99
500×500	250000	748001	750000	7482009	99.99

Вычисления были проведены на компьютере со следующей конфигурацией: процессор: AMD Athlon 64x2, CPU 2.4 GHz; память: 1 GB DDR 400 MHz; ОС: Windows XP SP2; средство компиляции: JDK 5.0.

В табл. 2 приведены результаты численных экспериментов для тестовых задач из таблицы.

Т а б л и ц а 2

Результаты вычислений для тестового набора

Размерность сеточной задачи	Метод решения / упорядочения	Количество обрабатываемых элементов в верхнем треугольнике	Размер факторизованной матрицы (основная + накладная память), Мб	Время на решение (упорядочение + разложение + решение), с
10 × 10	SDS/MD	6639	0.07	0.04
	SDS/ND	7908	0.09	0.01
	SDS/none	8781	0.10	0.01
	SkyLine/Sloan	6945	0.05	0.06
	SkyLine/RCM	6945	0.05	0.06
	SkyLine/King	7251	0.06	0.06
	SkyLine/none	8781	0.07	0.01
	Banded/CM	9900	0.08	0.03
Banded/none	9900	0.08	0.02	
30 × 30	SDS/MD	136053	1.55	0.18
	SDS/ND	137853	1.57	0.15
	SDS/none	240561	2.75	0.16
	SkyLine/Sloan	171135	1.32	0.12
	SkyLine/RCM	171135	1.32	0.09
	SkyLine/King	186696	1.43	0.18
	SkyLine/none	240561	1.85	0.11
	Banded/CM	251100	1.92	0.18
Banded/none	251100	1.92	0.14	
50 × 50	SDS/MD	517677	5.92	0.61
	SDS/ND	487590	5.58	0.40
	SDS/none	1117941	12.79	0.87
	SkyLine/Sloan	775725	5.95	0.56
	SkyLine/RCM	775725	5.95	0.42
	SkyLine/King	856041	6.56	0.96
	SkyLine/none	1117941	8.56	0.68
	Banded/CM	1147500	8.75	1.03
Banded/none	1147500	8.75	0.84	
70 × 70	SDS/MD	1228236	14.05	1.53
	SDS/ND	1104009	12.63	1.01
	SDS/none	3072921	35.16	3.14
	SkyLine/Sloan	2108715	16.14	1.87
	SkyLine/RCM	2108715	16.14	1.5
	SkyLine/King	2339286	17.90	3.46
	SkyLine/none	3072921	23,50	2.51
	Banded/CM	3131100	23,89	3.51
Banded/none	3131100	23,89	3.40	
100 × 100	SDS/MD	2980455	34.10	4.53
	SDS/ND	2578173	29.50	2.95
	SDS/none	8970891	102.66	13.14
	SkyLine/Sloan	6103950	46.68	7.51
	SkyLine/RCM	6103950	46.68	5.5
	SkyLine/King	6798966	51.99	13.10
	SkyLine/none	8970891	68.56	10.21
	Banded/CM	9090000	69.35	17.26
Banded/none	9090000	69.35	15.20	

Окончание табл. 2

Размерность сеточной задачи	Метод решения / упорядочения	Количество обрабатываемых элементов в верхнем треугольнике	Размер факторизованной матрицы (основная + накладная память), Мб	Время на решение (упорядочение + разложение + решение), с
150 × 150	SDS/MD	8133003	93.07	17.25
	SDS/ND	6680826	76.45	9.95
	SDS/none	30308841	346.85	69.06
	SkyLine/Sloan	20484675	156.54	38.31
	SkyLine/RCM	20484675	156.54	29.75
	SkyLine/King	22891266	174.90	67.01
	SkyLine/none	30308841	231.50	58.93
	Banded/CM	30577500	233.29	148.92
Banded/none	30577500	233.29	132.60	
200 × 200	SDS/MD	15911844	182.09	37.68
	SDS/ND	12989463	148.65	22.81
	SDS/none	71881791	822.62	209.25
	SkyLine/Sloan	48417900	369.86	119.70
	SkyLine/RCM	48417900	369.86	93.68
	SkyLine/King	54195441	413.94	207.23
	SkyLine/none	71881791	548.87	185.28
	Banded/CM	72360000	552.06	541.81
Banded/none	72360000	552.06	502.35	
300 × 300	SDS/MD	42591807	487.42	147.21
	SDS/ND	32910003	376.62	75.04
	SDS/none	242732691	2904.75	—
	SkyLine/Sloan	162941850	1244.18	—
	SkyLine/RCM	162941850	1244.18	—
	SkyLine/King	182689416	1394.84	—
	SkyLine/none	242732691	2904.75	—
	Banded/CM	243810000	1860.12	—
Banded/none	243810000	1860.12	—	
400 × 400	SDS/MD	82498875	944.12	343.26
	SDS/ND	63135240	722.52	183.21
500 × 500	SDS/MD	140201295	1604.47	—
	SDS/ND	104356788	1194.26	—

В табл. 2 используются следующие обозначения:

SDS(Sparse Direct Solver) — разреженный прямой метод, в полной мере использующий разреженность матрицы, ненулевые элементы в котором хранятся с помощью формата CSR;

SkyLine Solver — профильный метод;

Banded Solver — ленточный метод;

CM — алгоритм Катхилла — Макки;

RCM — обратный алгоритм Катхилла-Макки;

Sloan — алгоритм Слоана;

King — алгоритм Кинга;

MD — алгоритм минимальной степени;

ND — алгоритм вложенных сечений.

Знак «—» означает, что данная задача не была решена, по причине нехватки памяти (количество оперативной памяти, выделенной под факторизованную матрицу, превосходит 1 Gb) или превышения времени ожидания.

Приведенные ниже графики зависимости между размерностью задачи и количеством выделяемой памяти под факторизуемую матрицу (рис. 2) и зависимости между размерностью задачи и временем, затраченным на ее решение (рис. 3), показывают, как сильно прямые методы зависят от размерности задачи и в большинстве случаев имеют квадратичную зависимость. С увеличением размерности эффективность прямого метода очень быстро уменьшается.

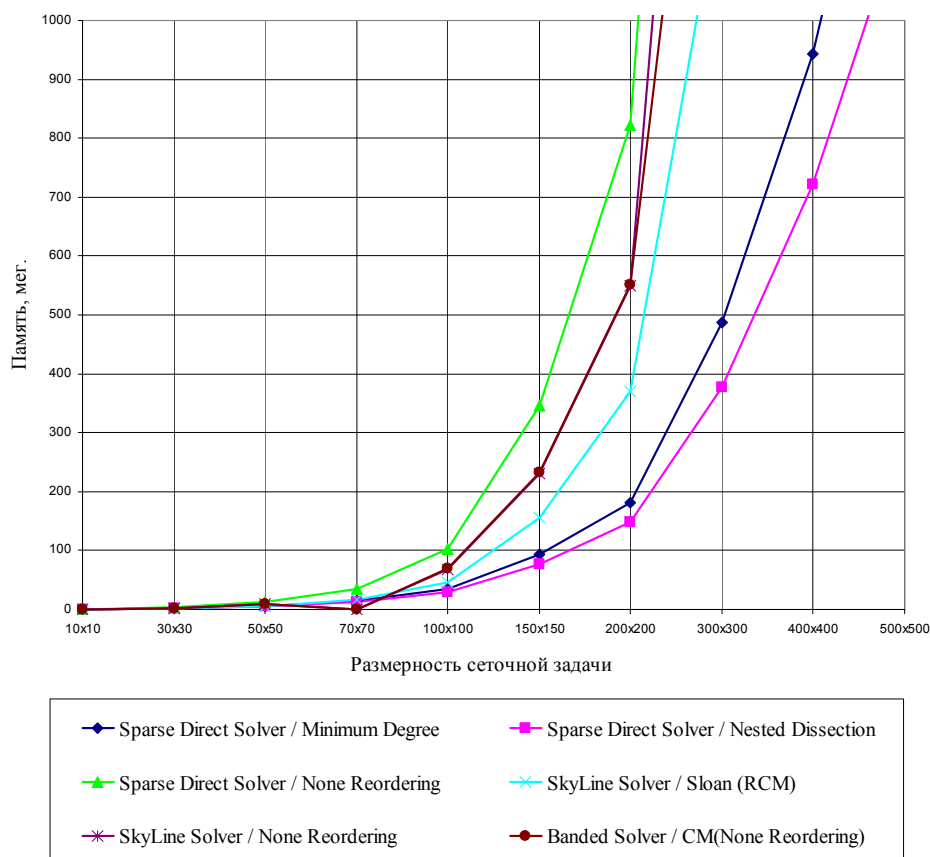


Рис. 2. Зависимость между размерностью задачи и количеством выделяемой памяти под факторизуемую матрицу

Для такого класса сеточных задач наиболее эффективным является использование SDS и упорядочения по алгоритму вложенных сечений, так как вследствие регулярности сетки, разделители, вставляемые в граф, разбивают его на примерно равные части, как по количеству узлов, так и структурно. Это позволяет получить довольно приемлемые упорядочения для данного класса задач по алгоритму вложенных сечений.

Но даже применение такого подхода возможно до определенной размерности. В рассмотренном нами примере, критическим является размер сетки 500×500 , поскольку для хранения факторизованной матрицы требуется более 1 Gb оперативной памяти.

Задачи малой размерности ($10 \times 10 \dots 100 \times 100$) данного класса могут быть решены эффективно любым из разработанных методов. Начиная с раз-

мерности 100×100 (до 200×200) применение ленточного метода и методов без применения упорядочения оказывается уже не эффективным. Здесь удачно работают профильные методы в сочетании с алгоритмами RCM, Sloan и SDS — методы с упорядочением MD или ND. Удержать рост вычислений и памяти, при решении задач размерностью свыше 200×200 могут только SDS-методы с упорядочением MD или ND.

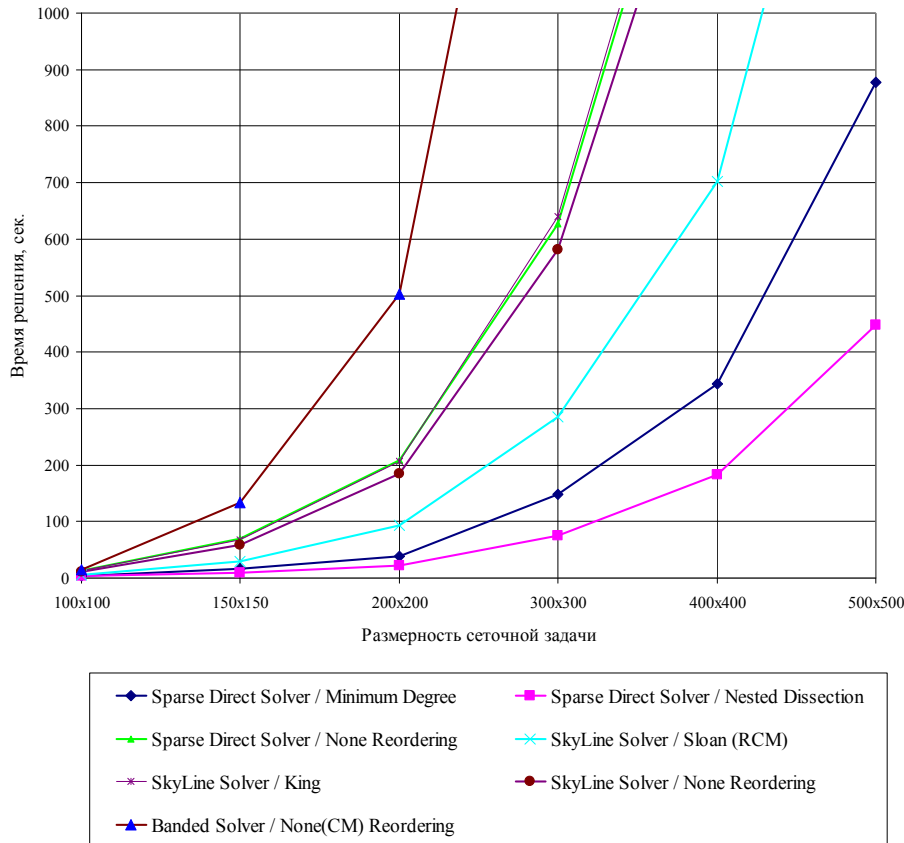


Рис. 3. Зависимость между размерностью задачи и временем, затраченным на ее решение

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Джордж А. Численное решение больших разреженных систем уравнений / А. Джордж, Дж. Лю М. : Мир, 1984. 333 с.
2. Златев З. Прямые методы для разреженных матриц / З. Златев, О. Эстербю. М. : Мир, 1987. 119 с.
3. Писсанецки С. Технология разреженных матриц. М. : Мир, 1988. 411 с.
4. Тьюарссон Р. Разреженные матрицы. М. : Мир, 1977. 172 с.
5. George A. Computer Implementation of the finite element method. Stanford University, 1971.
6. Liu J.W-H. Comparative analysis of the Cuthill — McKee and the reverse Cuthill — McKee ordering algorithms for sparse matrices / Joseph W-H Liu, Andrew H. Sherman. // SIAM J. Numer. Analysis 13 (1975). Pp. 198—213.
7. King L.P. An automatic reordering scheme for simultaneous equations derived from network problems // Internat. J. Numer. Meth Engrg. 2(1970). pp 523—533
8. Sloan S.W. A fortran program for profile and wavefront reduction // Internat. J. Numer. Meth Engrg. 28, 2651—2679 (1989).

Поступила в редакцию в мае 2008 г.

© Игнатьев А.В., Ромашкин В.Н., 2008