УДК 519.6

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,
E-mail: saukh@svitonline.com)

Метод *CR* факторизации матриц большой размерности

(Статью представила канд. техн. наук Э. П. Семагина)

Предложен новый метод столбцово-строчной (*CR*) факторизации матриц, который принципиально отличается от известного метода *LU* факторизации свойством адаптивности к динамически выбираемым ведущим элементам, что позволяет отказаться от перестановок строк и столбцов в процессе вычисления факторных матриц. Преимущество метода подтверждается результатами его тестирования на множестве матриц большой размерности. Показано, что при прочих равных условиях относительно точности полученных решений и задействованных объемов памяти метод *CR* факторизации предпочтительнее метода *LU* факторизации, поскольку позволяет существенно (в среднем более чем на треть) сократить время решения систем алгебраических уравнений большой размерности.

Запропоновано новий метод стовпцево-рядкової (*CR*) факторизації матриць, який принципово відрізняється від відомого методу *LU* факторизації властивістю адаптивності до динамічно обираємих провідних елементів, що дозволяє відмовитися від перестановок рядків та стовпчиків в процесі обчислення факторних матриць. Переваги методу підтверджено результатами його тестування на множині матриць великої розмірності. Показано, що за інших рівних умов стосовно точності отриманих рішень та задіяних обсягів пам’яті метод *CR* факторизації переважає метод *LU* факторизації, оскільки дозволяє суттєво (у середньому більше ніж на третину) скоротити час розв’язування систем алгебраїчних рівнянь великої розмірності.

К л ю ч е в ы е с л о в а: разреженные матрицы, ведущие элементы, перестановки строк и столбцов, столбцово-строчная факторизация, системы уравнений большой размерности.

Метод Гаусса и различные его варианты лежат в основе современных алгоритмов решения разреженных систем алгебраических уравнений большой размерности [1, 2]. Этот метод обеспечивает преобразование исходной системы уравнений вида $A\mathbf{X} = \mathbf{B}$ с заданными матрицей A и вектором $\mathbf{B}$ в систему уравнений вида $U\mathbf{X} = \mathbf{V}$ с верхнетреугольной матрицей U и вектором $\mathbf{V}$. Цель такого преобразования — обеспечить возможность применения простого алгоритма поиска искомого вектора $\mathbf{X}$ в преобразованной системе уравнений.

Одним из наиболее часто используемых вариантов метода Гаусса является метод треугольного разложения или LU факторизации. В этом случае матрица A представляется в виде произведения нижнетреугольной матрицы L и верхнетреугольной матрицы U. Разложение вида $A = LU$ осуществляется обособленно и не затрагивает вектор **B**. Поэтому решение исходной системы уравнений $A\mathbf{X} = \mathbf{B}$ или $LU\mathbf{X} = \mathbf{B}$ сводится к нахождению вначале вспомогательного вектора **V** из системы уравнений $L\mathbf{V} = \mathbf{B}$, а затем искомого вектора **X** из системы уравнений $U\mathbf{X} = \mathbf{V}$.

LU факторизация $n \times n$ матрицы A осуществляется последовательно за $n-1$ шагов. На k-м шаге вычисляются ненулевые элементы k-й строки матрицы U и k-го столбца матрицы L:

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks} u_{sj}, \; j = \overline{k, n};$$

$$l_{kk} = 1, \; l_{ik} = \frac{1}{u_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{s=1}^{k-1} l_{is} u_{sk} \right), \; i = \overline{k+1, n}. \tag{1}$$

Вычисленные элементы k-й строки матрицы U и k-го столбца матрицы L (кроме элемента $l_{kk} = 1$) записываются на место соответствующих элементов матрицы A. При этом остаются неизменными элементы нижней правоугловой активной подматрицы A_k матрицы A.

Необходимыми условиями осуществимости LU факторизации являются невырожденность матрицы A и неравенство нулю элементов u_{kk}. Осуществимость треугольного разложения невырожденной матрицы A всегда можно обеспечить, переупорядочив ее строки и столбцы так, чтобы выполнялись условия $u_{kk} \neq 0$. Для этого используют матрицы перестановок P и Q такие, что $PQA = LU$.

Перестановки определяются схемой выбора ведущих элементов в активной подматрице A_k. В большинстве случаев применяют схемы частичного выбора (т. е. выбора по столбцу, по строке, по нескольким столбцам, по нескольким строкам), реже — схемы полного выбора по всей активной подматрице A_k.

Особенности реализации метода Гаусса в условиях конечно-разрядных вычислений требуют такого выбора ведущих элементов a_{ij}, при котором ограничивается возрастание абсолютных значений элементов матриц L и U. Для этого на k-м шаге факторизации переставляют местами k-ю и i-ю строки, а также k-й и i-й столбцы матрицы A для того, чтобы максимизировать значение $|u_{kk}|$ и обеспечить численную устойчивость метода Гаусса [3—8].

В случае разреженных матриц большой размерности во внимание принимается влияние перестановок на уровень заполненности ненулевыми элементами матриц L и U, который может существенно превысить уровень заполненности ненулевыми элементами исходной матрицы A. Поскольку размеры массивов, используемые для размещения ненулевых элементов матриц L и U всегда ограничены физическими ресурсами компьютера, перестановки могут повлиять не только на объем вычислений, но и на возможность осуществить факторизацию в принципе.

Поэтому выбор ведущих элементов основан на сочетании требований обеспечения численной устойчивости метода Гаусса и минимизации уровня заполненности ненулевыми элементами матриц L и U. В соответствии с этими требованиями в современных программных средствах реализуются различные стратегии выбора ведущих элементов [3—6].

Хранение ненулевых элементов разреженных матриц большой размерности в строчных или связанных списках существенно затрудняет перестановки строк и столбцов [3—6]. Следует заметить, что реализация перестановок связана не с выполнением фактических пересылок значений ненулевых элементов в памяти вычислительного устройства, а с выполнением операций поиска и изменения значений строчных и столбцовых индексов. Кроме того, в общем случае списки столбцовых индексов в строках и списки строчных индексов в столбцах, подлежащих перестановкам, не совпадают, что усложняет реализацию соответствующих изменений их индексов.

Результаты исследований свидетельствуют о соизмеримости объемов операций, необходимых для реализации перестановок и осуществления собственно факторизации матриц в соответствии с формулами (1). Предлагаемый новый метод столбцово-строчной (CR) факторизации принципиально отличается от метода LU факторизации адаптированностью к выбору ведущих элементов, что позволяет отказаться от перестановок строк и столбцов в процессе формирования факторных матриц и ускорить процесс их вычисления.

Столбово-строчная факторизации матриц. Базовым соотношением метода является выражение

$$A = \mathbf{C}_j \mathbf{R}_i + A_1 \langle (i, j) \rangle, \tag{2}$$

в котором исходная $n \times n$ матрица A представляется суммой произведения $n \times 1$ вектор-столбца $\mathbf{C}_j$ на $1 \times n$ вектор-строку $\mathbf{R}_i$ и $n \times n$ матрицы $A_1 \langle (i, j) \rangle$.

Если элемент a_{ij} матрицы A не равен нулю, то, полагая равными нулю элементы i-й строки и j-го столбца матрицы $A_1 \langle (i, j) \rangle$, из соотношения (2) с точностью до некоторого множителя можно определить все элементы столбца $\mathbf{C}_j$ и строки $\mathbf{R}_i$. Неоднозначность «с точностью до некоторого множителя» в определении элементов столбца $\mathbf{C}_j$ и строки $\mathbf{R}_i$ обусловлена невозможностью найти из одного уравнения вида $c_{ij} r_{ij} = a_{ij}$ две искомые величины: c_{ij} и r_{ij}.

Для устранения неоднозначности в определении величин c_{ij} и r_{ij} следует принять одно из возможных допущений, например, вида

$$c_{ij} = 1, \tag{3}$$

$$r_{ij} = 1, \tag{4}$$

$$| c_{ij} | = | r_{ij} |. \tag{5}$$

Заметим, что допущения (3) и (4) аналогичны допущениям, принимаемым относительно диагональных элементов одной из факторных матриц L и U в методе LU факторизации. Так, в формулах (1) диагональные элементы матрицы L принимаем равными единице, что соответствует допущению (3). Допущение вида (5) также возможно в специальном варианте метода LU факторизации симметричных положительно определенных матриц, известного как метод LL^T факторизации Холесского или метод квадратного корня [7, 8].

Соотношение (2) определяет частичную одношаговую столбцово- строчную факторизацию матрицы A относительно ведущего элемента a_{ij}. Здесь столбец $\mathbf{C}_j$ и строка $\mathbf{R}_i$ являются множителями или факторами, а матрица $A_1\langle(i, j)\rangle$ — остаточной матрицей, элементы которой, кроме расположенных в i-й строке и j-м столбце, образуют активную $(n-1)\times(n-1)$ подматрицу.

На примере 6×6 матрицы A, у которой ведущим выбран элемент $a_{24} \neq 0$, покажем, как определить значения элементов столбца $\mathbf{C}_4$ и строки $\mathbf{R}_2$. В соответствии с выражением (2) запишем

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{vmatrix} = \mathbf{C}_4\mathbf{R}_2 + A_1\langle(2,4)\rangle =$$

$$= \begin{vmatrix} c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{54} & c_{64} \end{vmatrix}^T \begin{vmatrix} r_{21} & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} & r_{26} \end{vmatrix} + A_1\langle(2,4)\rangle =$$

$$= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & c_{14}r_{24} & a_{15} & a_{16} \\ c_{24}r_{21} & c_{24}r_{22} & c_{24}r_{23} & c_{24}r_{24} & c_{24}r_{25} & c_{24}r_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & c_{34}r_{24} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & c_{44}r_{24} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & c_{54}r_{24} & a_{55} & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & c_{64}r_{24} & a_{65} & a_{66} \end{vmatrix}, \tag{6}$$

где

$$A_1\langle(2,4)\rangle = \begin{vmatrix} a_{11}-c_{14}r_{21} & a_{12}-c_{14}r_{22} & a_{13}-c_{14}r_{23} & 0 & a_{15}-c_{14}r_{25} & a_{16}-c_{14}r_{26} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{31}-c_{34}r_{21} & a_{32}-c_{34}r_{22} & a_{33}-c_{34}r_{23} & 0 & a_{35}-c_{34}r_{25} & a_{36}-c_{34}r_{26} \\ a_{41}-c_{44}r_{21} & a_{42}-c_{44}r_{22} & a_{43}-c_{44}r_{23} & 0 & a_{45}-c_{44}r_{25} & a_{46}-c_{44}r_{26} \\ a_{51}-c_{54}r_{21} & a_{52}-c_{54}r_{22} & a_{53}-c_{54}r_{23} & 0 & a_{55}-c_{54}r_{25} & a_{56}-c_{54}r_{26} \\ a_{61}-c_{64}r_{21} & a_{62}-c_{64}r_{22} & a_{63}-c_{64}r_{23} & 0 & a_{65}-c_{64}r_{25} & a_{66}-c_{64}r_{26} \end{vmatrix}. \tag{7}$$

Из уравнения (6) с учетом (7) следует система равенств

$$c_{24}r_{24} = a_{24}, \tag{8}$$

$$r_{24}\mathbf{C}_4 = r_{24}|c_{14} \quad c_{24} \quad c_{34} \quad c_{44} \quad c_{54} \quad c_{64}|^T = |a_{14} \quad a_{24} \quad a_{34} \quad a_{44} \quad a_{54} \quad a_{64}|^T, \tag{9}$$

$$c_{24}\mathbf{R}_2 = c_{24}|r_{21} \quad r_{22} \quad r_{23} \quad r_{24} \quad r_{25} \quad r_{26}| = |a_{21} \quad a_{22} \quad a_{23} \quad a_{24} \quad a_{25} \quad a_{26}|, \tag{10}$$

из которой можно определить элементы столбца $\mathbf{C}_4$ и строки $\mathbf{R}_2$ с точностью до некоторого множителя. Проблема неоднозначности в определении этих элементов устраняется путем привлечения одного из допущений вида (3) — (5) в отношении искомых величин c_{24} и r_{24}, одновременно входящих в уравнение (8). Так, полагая $c_{24}=1$ либо $r_{24}=1$, либо $|c_{24}|=|r_{24}|$, из системы уравнений (8) — (10) можно легко определить искомые элементы столбца $\mathbf{C}_4$ и строки $\mathbf{R}_2$.

Анализируя структуру матрицы $A_1\langle(i,j)\rangle$ в соотношении (2), замечаем, что найденные элементы столбца $\mathbf{C}_j$ и строки $\mathbf{R}_i$ естественно расположить в матрице $A_1\langle(i,j)\rangle$ на месте нулевых элементов ее i-й строки и j-го столбца. Такое совмещение элементов столбца $\mathbf{C}_j$ и строки $\mathbf{R}_i$ с элементами матрицы $A_1\langle(i,j)\rangle$ приводит к формированию совмещенной матрицы вида

$$A_1^{CR}\langle(i,j)\rangle = A_1\langle(i,j)\rangle \oplus (\mathbf{C}_j, \mathbf{R}_i), \tag{11}$$

где символом $\oplus$ обозначена операция совмещения.

В данном примере матрица (7) после размещения в ней элементов столбца $\mathbf{C}_4$ и строки $\mathbf{R}_2$ примет вид

$$A_1^{CR}\langle(2,4)\rangle = A_1\langle(2,4)\rangle \oplus (\mathbf{C}_4, \mathbf{R}_2) =$$

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

где, для сохранения универсальности формы записи, через (c_{24}, r_{24}) обозначен элемент, значение которого устанавливается в зависимости от выбираемого из (3) — (5) варианта допущения. Следовательно, такой элемент может принять одно из следующих значений:

$$
(c_{24}, r_{24}) = r_{24}, \; (c_{24}, r_{24}) = c_{24},
$$

$$
(c_{24}, r_{24}) = \operatorname{sign}(a_{24}) \sqrt{|a_{24}|}.
$$

Таким образом, соотношения (2) — (5), (11) определяют первый шаг столбцово-строчной факторизации матрицы A относительно ведущего элемента a_{ij} без перестановок строк и столбцов. Следующий аналогичный шаг факторизации осуществляется относительно ведущего элемента, выбираемого в активной части матрицы $A_1\langle(i,j)\rangle$, совпадающей с аналогичной частью матрицы $A_1^{CR}\langle(i,j)\rangle$.

Если в качестве ведущего выбран элемент $a_{pq} - c_{pi} r_{jq} \neq 0$, находящийся на пересечении p-й строки и q-го столбца матрицы $A_1\langle(i,j)\rangle$, то, приняв во внимание тождество (2), можем записать

$$
A_1\langle(i,j)\rangle = \mathbf{C}_q \mathbf{R}_p + A_2\langle(i,j),(p,q)\rangle, \tag{13}
$$

где $n\times 1$ вектор-столбец $\mathbf{C}_q$ и $1\times n$ вектор-строка $\mathbf{R}_p$ содержат по нулевому элементу $c_{iq} = 0$ и $r_{pj} = 0$, а $n\times n$ матрица $A_2\langle(i,j),(p,q)\rangle$ имеет две нулевые строки и два нулевых столбца с номерами соответственно i, p и j, q.

После подстановки (13) в (2) получаем

$$
A = \mathbf{C}_j \mathbf{R}_i + \mathbf{C}_q \mathbf{R}_p + A_2\langle(i,j),(p,q)\rangle, \tag{14}
$$

или в совмещенной форме

$$
A_2^{CR}\langle(i,j),(p,q)\rangle = A_2\langle(i,j),(p,q)\rangle \oplus (\mathbf{C}_j, \mathbf{R}_i, \mathbf{C}_q, \mathbf{R}_p)\,. \tag{15}
$$

Покажем особенности реализации второго шага факторизации, приняв в качестве ведущего элемент $a_{46} - c_{44} r_{26} \neq 0$, расположенный на пересечении четвертой строки и шестого столбца матрицы $A_1\langle(2,4)\rangle$ вида (7). Используя выражение (13), запишем

$$
A_1\langle(2,4)\rangle = \mathbf{C}_6 \mathbf{R}_4 + A_2\langle(2,4),(4,6)\rangle\,. \tag{16}
$$

Из выражений (6), (7), (14) и (16) получим

$$A=\mathbf{C}_4\mathbf{R}_2+A_1\langle(2{,}4)\rangle=\mathbf{C}_4\mathbf{R}_2+\mathbf{C}_6\mathbf{R}_4+A_2\langle(2{,}4),(4{,}6)\rangle=$$

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

$$+\begin{vmatrix}c_{16} & 0 & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66}\end{vmatrix}^T\begin{vmatrix}r_{41} & r_{42} & r_{43} & 0 & r_{45} & r_{46}\end{vmatrix}+A_2\langle(2{,}4),(4{,}6)\rangle=$$

$$=\begin{vmatrix}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & c_{14}r_{24} & a_{15} & c_{14}r_{26}+c_{16}r_{46}\\
c_{24}r_{21} & c_{24}r_{22} & c_{24}r_{23} & c_{24}r_{24} & c_{24}r_{25} & c_{24}r_{26}\\
a_{31} & a_{32} & a_{33} & c_{34}r_{24} & a_{35} & c_{34}r_{26}+c_{36}r_{46}\\
c_{44}r_{21}+c_{46}r_{21} & c_{44}r_{22}+c_{46}r_{42} & c_{44}r_{23}+c_{46}r_{43} & c_{44}r_{24} & c_{44}r_{25}+c_{46}r_{45} & c_{44}r_{26}+c_{46}r_{46}\\
a_{51} & a_{52} & a_{53} & c_{54}r_{24} & a_{55} & c_{54}r_{26}+c_{56}r_{46}\\
a_{61} & a_{62} & a_{63} & c_{64}r_{24} & a_{65} & c_{64}r_{26}+c_{66}r_{46}
\end{vmatrix}, \tag{17}$$

где

$$A_2\langle(2{,}4),(4{,}6)\rangle=$$

$$=\begin{vmatrix}
a_{11}-c_{14}r_{21}-c_{16}r_{41} & a_{12}-c_{14}r_{22}-c_{16}r_{42} & a_{13}-c_{14}r_{23}-c_{16}r_{43} & 0 & a_{15}-c_{14}r_{25}-c_{16}r_{45} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
a_{31}-c_{34}r_{21}-c_{36}r_{41} & a_{32}-c_{34}r_{22}-c_{36}r_{42} & a_{33}-c_{34}r_{23}-c_{36}r_{43} & 0 & a_{35}-c_{34}r_{25}-c_{36}r_{45} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
a_{51}-c_{54}r_{21}-c_{56}r_{41} & a_{52}-c_{54}r_{22}-c_{56}r_{42} & a_{53}-c_{54}r_{23}-c_{56}r_{43} & 0 & a_{55}-c_{54}r_{25}-c_{56}r_{45} & 0\\
a_{61}-c_{64}r_{21}-c_{66}r_{41} & a_{62}-c_{64}r_{22}-c_{66}r_{42} & a_{63}-c_{64}r_{23}-c_{66}r_{43} & 0 & a_{65}-c_{64}r_{25}-c_{66}r_{45} & 0
\end{vmatrix}. \tag{18}$$

Из системы уравнений (17) с учетом (18) сформируем следующую систему уравнений:

$$c_{46}r_{46}=a_{46}-c_{44}r_{26},$$

$$r_{46}\mathbf{C}_6=r_{46}\begin{vmatrix}c_{16} & 0 & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66}\end{vmatrix}^T=$$

$$=\begin{vmatrix}a_{16}-c_{14}r_{26} & 0 & a_{36}-c_{34}r_{26} & a_{46}-c_{44}r_{26} & a_{56}-c_{54}r_{26} & a_{66}-c_{54}r_{26}\end{vmatrix}^T,$$

$$c_{46}\mathbf{R}_4=c_{46}\begin{vmatrix}r_{41} & r_{42} & r_{43} & 0 & r_{45} & r_{46}\end{vmatrix}=$$

$$=\begin{vmatrix}a_{41}-c_{44}r_{21} & a_{42}-c_{44}r_{22} & a_{43}-c_{44}r_{23} & 0 & a_{45}-c_{44}r_{25} & a_{46}-c_{44}r_{26}\end{vmatrix},$$

которая, будучи дополненной одним из допущений вида (3) — (5) относительно искомых величин c_{46} и r_{46}, может быть легко решена относительно остальных искомых элементов столбца $\mathbf{C}_6$ и строки $\mathbf{R}_4$.

Определенные на втором шаге столбцово-строчной факторизации матрицы A столбец $\mathbf{C}_6$ и строка $\mathbf{R}_4$, как и найденные на первом шаге факторизации столбец $\mathbf{C}_4$ и строка $\mathbf{R}_2$, размещаются в матрице $A_2\langle(2,4),(4,6)\rangle$ на «свободных» местах, т.е. на месте нулевых строк 4, 2 и столбцов 6, 4. Таким образом формируется совмещенная матрица вида

$$A_2^{CR}\langle(2,4),(4,6)\rangle = A_2\langle(2,4),(4,6)\rangle \oplus (\mathbf{C}_4, \mathbf{R}_2, \mathbf{C}_6, \mathbf{R}_4) =$$

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

На основе выражений (2) и (13), определяющих частичную одно- и двухшаговую солбцово-строчную факторизацию, получаем формулу полной *CR* факторизации невырожденной $n \times n$ матрицы A для случая, когда координаты (i, j) динамически выбираемых в процессе факторизации ведущих элементов образуют некоторое упорядоченное множество P:

$$A = \sum_{(i,j)\in P} \mathbf{C}_j \mathbf{R}_i. \tag{19}$$

Здесь суммирование осуществляется в порядке следования элементов в множестве P. Следует заметить, что в отличие от (2) и (14) правая часть выражения (19) не содержит матричных слагаемых вида $A_n\langle P\rangle$, поскольку в процессе их формирования за n шагов устанавливались равными нулю значения элементов тех n строк и n столбцов, на пересечении которых выбирались ведущие элементы. Именно на этих местах размещались вектор-столбцы $\mathbf{C}_j$ и вектор-строки $\mathbf{R}_i$, формируя совмещенную матрицу $A^{CR}\langle P\rangle$. Поэтому $A_n\langle P\rangle \equiv 0$. Очевидно, выражение (19) может быть представлено в матричном виде:

$$A = C\langle P\rangle\, R\langle P\rangle, \tag{20}$$

где матрицы $C\langle P\rangle$ и $R\langle P\rangle$ составлены соответственно из вектор-столбцов $\mathbf{C}_j$ и вектор-строк $\mathbf{R}_i$, расположенных в том порядке, в котором их индексы встречаются в множестве P. Однако порядок размещения вектор-столбцов $\mathbf{C}_j$ и вектор-строк $\mathbf{R}_i$ в совмещенной матрице вида

$$A^{CR}\langle P\rangle = C^{CR} \oplus R^{CR} \tag{21}$$

соответствует номерам их индексов j и i, т. е. вместо матриц $C\langle P\rangle$ и $R\langle P\rangle$ в матрице $A^{CR}\langle P\rangle$ фактически совмещаются две матрицы: $C^{CR}\langle P\rangle$ и $R^{CR}\langle P\rangle$.

Матрицы $C\langle P\rangle$ и $R\langle P\rangle$ в общем случае не принимают треугольную форму. Только когда в процессе *CR* факторизации ведущие элементы выбираются последовательно в координатах $P\langle(1{,}1),(2{,}2),\ldots,(n,n)\rangle$, формируемые вектор-столбцы $\mathbf{C}_j$ и вектор-строки $\mathbf{R}_i$ образуют нижнетреугольную и верхнетреугольную матрицы $C\langle P\rangle = L$ и $R\langle P\rangle = U$, которые располагаются в совмещенной матрице $A^{CR}\langle P\rangle$ так, что $C^{CR}\langle P\rangle = C\langle P\rangle = L$ и $R^{CR}\langle P\rangle = R\langle P\rangle = U$.

Основная структурная особенность матриц $C\langle P\rangle$ и $R\langle P\rangle$ общего вида заключается в том, что они могут быть в принципе преобразованы к треугольному виду путем перестановок строк и столбцов. Обращаясь к рассматриваемому примеру, покажем особенности формирования факторных матриц $C\langle P\rangle$, $R\langle P\rangle$, $C^{CR}\langle P\rangle$ и $R^{CR}\langle P\rangle$.

Пусть последовательность выбора и местоположение ведущих элементов образует упорядоченное множество $P\langle(2{,}4),(4{,}6),(6{,}2),(3{,}5),(5{,}1),(1{,}3)\rangle$. Тогда, очевидно,

$$A = \mathbf{C}_4\mathbf{R}_2 + A_1\langle(2{,}4)\rangle = \mathbf{C}_4\mathbf{R}_2 + \mathbf{C}_6\mathbf{R}_4 + A_2\langle(2{,}4),(4{,}6)\rangle =$$
$$= \mathbf{C}_4\mathbf{R}_2 + \mathbf{C}_6\mathbf{R}_4 + \mathbf{C}_2\mathbf{R}_6 + A_3\langle(2{,}4),(4{,}6),(6{,}2)\rangle = \ldots =$$
$$= \mathbf{C}_4\mathbf{R}_2 + \mathbf{C}_6\mathbf{R}_4 + \mathbf{C}_2\mathbf{R}_6 + \mathbf{C}_5\mathbf{R}_3 + \mathbf{C}_1\mathbf{R}_5 + \mathbf{C}_3\mathbf{R}_1 +$$
$$+ A_6\langle(2{,}4),(4{,}6),(6{,}2),(3{,}5),(5{,}1),(1{,}3)\rangle.$$

Однако 6×6 матрица $A_6\langle(2{,}4),(4{,}6),(6{,}2),(3{,}5),(5{,}1),(1{,}3)\rangle$ тождественна нулю, так как в процессе ее формирования за шесть шагов устанавливались равными нулю значения элементов тех шести строк и шести столбцов, на попарных пересечениях которых выбирались ведущие элементы в активных подматрицах. Следовательно,

$$A = \mathbf{C}_4\mathbf{R}_2 + \mathbf{C}_6\mathbf{R}_4 + \mathbf{C}_2\mathbf{R}_6 + \mathbf{C}_5\mathbf{R}_3 + \mathbf{C}_1\mathbf{R}_5 + \mathbf{C}_3\mathbf{R}_1 =$$
$$= \left|\mathbf{C}_4\ \mathbf{C}_6\ \mathbf{C}_2\ \mathbf{C}_5\ \mathbf{C}_1\ \mathbf{C}_3\right| \times \left|\mathbf{R}_2\ \mathbf{R}_4\ \mathbf{R}_6\ \mathbf{R}_3\ \mathbf{R}_5\ \mathbf{R}_1\right|^T = C\langle P\rangle R\langle P\rangle.$$

Отсюда, учитывая расположение вектор-столбцов $\mathbf{C}_j$ и вектор-строк $\mathbf{R}_i$ в совмещенной матрице $A^{CR}\langle P\rangle$, окончательно получаем

$$A^{CR}\langle P\rangle = C^{CR}\langle P\rangle \oplus R^{CR}\langle P\rangle =$$
$$= \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & (c_{13}, r_{13}) & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} & (c_{24}, r_{24}) & r_{25} & r_{26} \\ r_{31} & c_{32} & r_{33} & c_{34} & (c_{35}, r_{35}) & c_{36} \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} & c_{44} & r_{45} & (c_{46}, r_{46}) \\ (c_{51}, r_{51}) & c_{52} & r_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ r_{61} & (c_{62}, r_{62}) & r_{63} & c_{64} & r_{65} & c_{66} \end{vmatrix}, \quad (22)$$

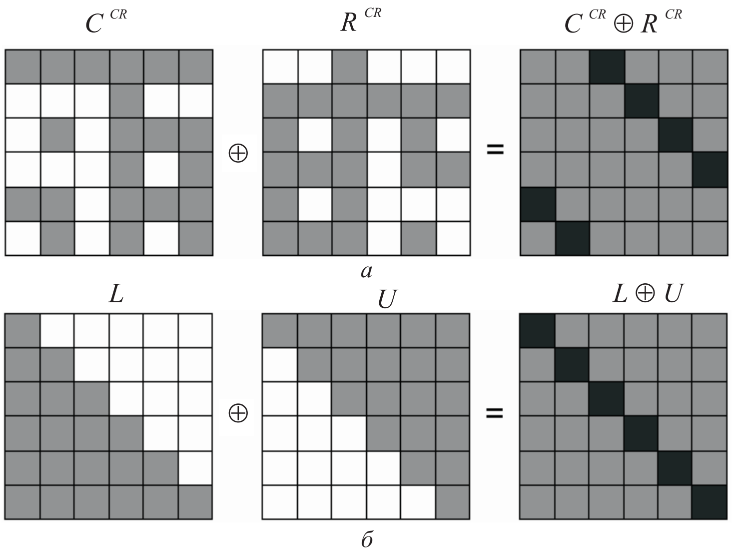

Рис. 1. Структуры факторных матриц, полученных методами *CR* (*а*) и *LU* (*б*) факторизации: □ — нулевые элементы; ▩ — ненулевые элементы; ■ — элементы вида (c_{ij}, r_{ij}) или (l_{ij}, u_{ij})

где

$$C^{CR}\langle P\rangle = |\mathbf{C}_1 \quad \mathbf{C}_2 \quad \mathbf{C}_3 \quad \mathbf{C}_4 \quad \mathbf{C}_5 \quad \mathbf{C}_6|,$$

$$R^{CR}\langle P\rangle = |\mathbf{R}_1 \quad \mathbf{R}_2 \quad \mathbf{R}_3 \quad \mathbf{R}_4 \quad \mathbf{R}_5 \quad \mathbf{R}_6|^T,$$

или

$$C^{CR}\langle P\rangle = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ 0 & 0 & 0 & c_{24} & 0 & 0 \\ 0 & c_{32} & 0 & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & 0 & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ 0 & c_{62} & 0 & c_{64} & 0 & c_{66} \end{vmatrix},$$

$$R^{CR}\langle P\rangle = \begin{vmatrix} 0 & 0 & r_{13} & 0 & 0 & 0 \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} & r_{26} \\ r_{31} & 0 & r_{33} & 0 & r_{35} & 0 \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} & 0 & r_{45} & r_{46} \\ r_{51} & 0 & r_{53} & 0 & 0 & 0 \\ r_{61} & r_{62} & r_{63} & 0 & r_{65} & 0 \end{vmatrix}.$$

Структурные особенности сформированных матриц C^{CR} и R^{CR} показаны на рис. 1, из которого видно, как последовательно осуществляя перестановки строк и столбцов в соответствии с $P\langle(2,4),(4,6),(6,2),(3,5),(5,1),(1,3)\rangle$, можно придать этим матрицам треугольные формы, такие же, как у матриц L и U.

Метод CR факторизации можно легко реализовать в виде алгоритма для случая размещения исходной невырожденной матрицы A, а также ее факторных матриц $C^{CR}\langle P\rangle$ и $R^{CR}\langle P\rangle$ в двумерном массиве a.

Алгоритм 1.

```
for z = 1:n
    Pr(z) = z
    Pc(z) = z
end
for k = 1:n
      Select the pivot entry a(i,j) in sub matrix
      {  a(z,t): z ∈ Pr(zk) | zk = k:n
                t ∈ Pc(tk) | tk = k:n  }
      Index interchange in Pr and Pc
      Pr(i) = k; Pr(k) = i;
    Pc(j) = k; Pc(k) = j;
    if a(i,j) > 0 a(i,j) = sqrt( a(i,j) )
             else a(i,j) = –sqrt( –a(i,j) )
    for zz = k + 1:n
             z = Pr(zz)
             a(z,j) = a(z,j)/a(i,j)
             z = Pc(zz)
             a(i,z) = a(i,z)/|a(i,j)|
    end
    for zz = k + 1:n
             z = Pr(zz)
             for tt = k + 1:n
                  t = Pc(tt)
                  a(z,t) = a(z,t) – a(z,j)*a(i,t)
             end
    end
end
```

Здесь упорядоченное множество P, содержащее координаты (i, j) динамически выбираемых в процессе факторизации ведущих элементов a(i,j), представлено двумя массивами Pr и Pc раздельно сохраняющими индексы строк i и столбцов j. Для устранения неоднозначности в определении величин c_{ij} и r_{ij} столбца $\mathbf{C}_j$ и строки $\mathbf{R}_i$ в алгоритме 1 использовано допущение (5). Очевидно, в случае применения иного допущения, например вида (3) или (4), алгоритм будет несколько проще.

Следует заметить, что алгоритм 1 не содержит перестановок строк и столбцов. В этом его принципиальное отличие от известных алгоритмов LU факторизации. Алгоритм CR факторизации завершается формированием совмещенной матрицы $A^{CR}\langle P\rangle$ вида (21), содержащей нетреугольные по форме факторные матрицы, которые могут быть непосредственно использованы для решения системы уравнений вида $AX = B$.

Решение систем линейных алгебраических уравнений. Сопоставляя структуры полученных факторных матриц C^{CR} и R^{CR} вида (22) со структурами матриц L и U, сформированных для той же матрицы A методом LU факторизации (см. рис. 1), проанализируем различия в использовании этих матриц для решения систем линейных алгебраических уравнений.

Основой решения систем уравнений с факторными матрицами коэффициентов является метод подстановок, реализующий последовательное решение уравнений с постепенно возрастающим на единицу на каждом шаге числом неизвестных, начиная с уравнения с одним неизвестным и заканчивая уравнением с n неизвестными. Однако, если решение систем с треугольными матрицами L и U всегда осуществляется относительно неизвестных при диагональных коэффициентах, то системы уравнений с матричными коэффициентами C или R могут быть решены подстановками только при наличии дополнительной информации о координатах и последовательности выбора ведущих элементов, относительно которых осуществлялась факторизация. Такая информация позволяет установить очередность решаемых уравнений и номер переменной, определяемой на каждом шаге решения соответствующих систем уравнений.

Покажем это на примере. Пусть к 6×6 матрице A системы уравнений вида $AX = B$ применена CR факторизация по ведущим элементам с координатами $P\langle(2,4),(4,6),(6,2),(3,5),(5,1),(1,3)\rangle$:

$$C\langle P\rangle R\langle P\rangle X = B.$$

Тогда из уравнения

$$C\langle P\rangle V = B \tag{23}$$

можно последовательно найти элементы вспомогательного вектора,

$$v_4 = \frac{b_2}{c_{24}},\ v_6 = \frac{b_4 - c_{44}v_4}{c_{46}},\ \ldots,\ v_3 = \frac{b_1 - c_{11}v_1 - c_{12}v_2 - c_{14}v_4 - c_{15}v_5 - c_{16}v_6}{c_{13}}, \tag{24}$$

а из уравнения

$$R\langle P\rangle X = V \tag{25}$$

определить элементы искомого вектора:

$$x_3 = \frac{v_1}{r_{31}},\ x_1 = \frac{v_5 - r_{31}x_3}{r_{15}},\ \dots,\ x_4 = \frac{v_2 - r_{21}x_1 - r_{22}x_2 - r_{23}x_3 - r_{25}x_5 - r_{26}x_6}{r_{24}}. \tag{26}$$

Анализируя в (24) и (26) очередность вычисления неизвестных и порядок используемых уравнений, замечаем их соответствие порядку расположения индексных элементов в множестве $P\langle(2,4),(4,6),(6,2),(3,5),(5,1),(1,3)\rangle$. Следовательно, процедуры решения систем уравнений (23) и (25) могут быть легко формализованы. Алгоритм решения систем уравнений вида $C\langle P\rangle R\langle P\rangle X = B$ для случая $n\times n$ матриц C^{CR} и R^{CR}, полученных с помощью алгоритма 1 и размещенных совместно в массиве a размерностью $n\times n$, имеет следующий вид.

А л г о р и т м 2.

```
for k = 1:n
      i = Pr(k)
      j = Pc(k)
      x(j) = b(i)
      for z = 1:k – 1
            x(j) = x(j) – a(i,z)*x(z)
      end
      x(j) = x(j)/|a(i,j)|
end
for k = 1:n
      nk = n – k + 1
      i = Pr(nk)
      j = Pc(nk)
      for z = nk + 1:n
            x(j) = x(j) – a(i,z)*x(z)
      end
      x(j) = x(j)/a(i,j)
end
```

Матрицы большой размерности. В случае размещения матрицы A в двумерном массиве a объемы вычислений, требуемые для ее CR и LU факторизации, отличаются незначительно. Отсутствие в методе CR факторизации n^2 операций перестановки элементов строк и столбцов матрицы A, необходимых в методе LU факторизации, возможно, но появление n^2

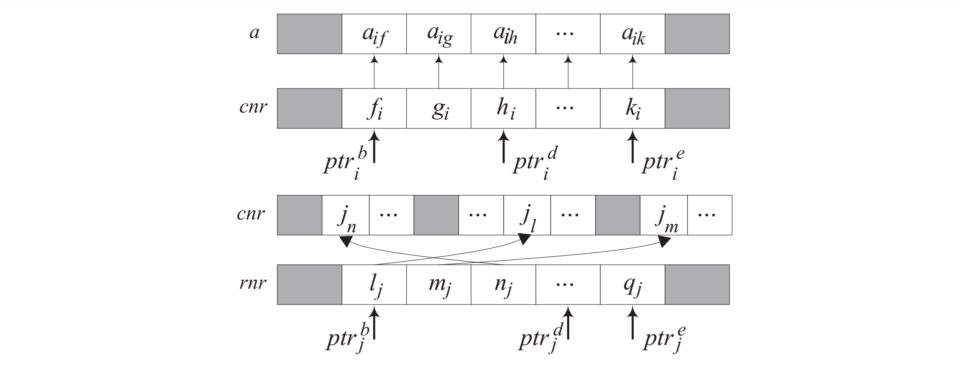

Рис. 2. Нахождение элемента a_{ij} матрицы A, размещенной в формате RR(C)U

операций извлечения индексов обрабатываемых элементов из массивов Pr и Pc в конечном итоге не приводит к существенной разнице объемов вычислений.

Однако в случае разреженных матриц большой размерности различие в объемах вычислений становится весьма заметным, поскольку использование специальных форматов размещения матриц в виде строчных или связанных списков усложняет выполнение в них операций перестановки элементов строк и столбцов. Для обоснования этого утверждения оценим объем вычислительных затрат, необходимых для выполнения операций перестановок строк и столбцов, например, в наиболее популярном формате строчных списков RR(C)U [3—6].

В формате RR(C)U все ненулевые элементы матрицы A построчно, без соблюдения порядка следования элементов в пределах каждой строки, размещаются в одномерном массиве a длиной nnz. При этом массиву a ставятся в соответствие массивы столбцовых и строчных индексов cnr и rnr так, что массив столбцовых индексов cnr поэлементно синхронизируется с массивом a, а в массиве rnr размещаются постолбцовые неупорядоченные списки строчных номеров ненулевых элементов.

Поиск элемента a_{ij} в массиве a осуществляется посредством указателей на первые и последние элементы столбцовых индексов i-й строки из списка cnr и строчных индексов j-го столбца из списка rnr (рис. 2). Через указатели ptr_j^b и ptr_j^e на начало и конец строчных индексов j-го столбца в списке rnr просматриваем номера строк $l_j, m_j, ..., q_j$, среди которых находим такой, который имеет значение i. Аналогично через указатели ptr_i^b и ptr_i^e на начало и конец столбцовых индексов i-й строки в списке cnr просматриваем номера столбцов $f_i, g_i, ..., k_i$ и находим такой, который имеет значение j. По местоположению в массиве *cnr* найденного индекса j находим элемент a_{ij}. Таким образом, для нахождения элементов с интересующими нас индексами строки i и столбца j необходимо через указатели ограничить области поиска в *rnr* и *cnr*, а затем в цикле по элементам выделенных областей осуществить проверку на соответствие искомым значениям выбираемых из *rnr* и *cnr* значений индексов i и j.

Если предположить равновероятными расположения искомых индексов строки и столбца в какой-либо из позиций выделенных указателями подобластей из S_{cnr} и S_{rnr} элементов массивов *cnr* и *rnr*, то средний объем операций выборки-сравнения для поиска индексов i и j можно оценить величиной $1/2(S_{cnr}+S_{rnr})$.

В программной реализации метода *LU* факторизации матрицы A нет никакой необходимости осуществлять пересылку в памяти значений элементов массива a, но есть необходимость в изменении значений индексов переставляемых строк и столбцов. Если число перестановок соизмеримо с порядком n матрицы A, то общее число операций выборки-сравнения индексов может достигать величины $n(S_{cnr}^2+S_{rnr}^2)/2$ и быть сравнимым с количеством операций по осуществлению собственно *LU* факторизации. Именно поэтому, используя предлагаемый метода *CR* факторизации матрицы A, можно существенно сократить объем вычислений за счет невыполнения операций выборки-сравнения в объеме порядка $n(S_{cnr}^2+S_{rnr}^2)/2\sim$ $\sim S\,nnz_0$, где S — среднее число элементов в строчных и столбцовых списках массивов *cnr* и *rnr*, а nnz_0 — среднее число ненулевых элементов, размещаемых в массиве a в процессе *LU* факторизации матрицы A.

Кроме того, метод *CR* факторизации матрицы A, размещенной в формате RR(C)U, не требует специальных операций извлечения индексов обрабатываемых элементов из массивов Pr и Pc, как в алгоритме 1, поскольку в данном случае используются вспомогательные указатели ptr_i^d и ptr_j^d для разделения элементов уже сформированных вектор-столбцов $\mathbf{C}_j$ и вектор-строк $\mathbf{R}_i$ от матричных слагаемых $A_v\langle P\rangle\ v=1:n$ (см. рис. 2). Указатели ptr_i^d и ptr_j^d используются также в методе *LU* факторизации матрицы A для разделения уже вычисленных элементов матриц L, U и элементов активных подматриц [3—5].

Результаты экспериментальных исследований. Очевидно, операции выборки-сравнения индексов строчных и столбцовых списков ненулевых матричных элементов не могут быть непосредственно соотнесены с арифметическими операциями, выполняемыми в процессе факторизации над самими элементами. Поэтому полученную выше верхнюю оценку числа операций выборки-сравнения следует дополнить экспериментальными оценками затрат времени на выполнение таких операций и оценить их удельный вес в общих затратах времени на факторизацию матриц.

Вычисления выполнялись на компьютере Intel P4 (Chipset Intel 865 PE, FSB 800 MHz, CPU 3.0GHz with HT, Dual Channel Memory 1 GB: 2×512MB, DDR400), работающем под управлением операционной системы Microsoft Windows XP.

В основу экспериментальных исследований положен программный код, написанный автором на языке C++ в среде Microsoft Visual Studio.Net. В нем последовательно реализованы три алгоритма решения системы линейных алгебраических уравнений вида $A\mathbf{X} = \mathbf{B}$ с вектором правой части $\mathbf{B} = A\mathbf{1}$, где $\mathbf{1}$ — единичный вектор.

Первый алгоритм реализует метод CR факторизации матрицы A с улучшенной обобщенной стратегией Марковица выбора ведущих элементов, описанной в работе [4].

Второй алгоритм реализует метод CR факторизации той же матрицы A, использующий уже сформированное в первом алгоритме множество P последовательности выбора и координат ведущих элементов.

Третий алгоритм отличается от второго только тем, что он реализует метод LU факторизации. В обоих реализациях метода CR факторизации матрицы A используется предположение (3).

Выполнение написанного программного кода позволяет ценить суммарные затраты времени вычислений на поиск решения X по заданному вектору $\mathbf{B}$ и дифференцировать затраты времени вычислений на CR и LU факторизацию. При этом обеспечивается выполнение равенства $nnz\,(C^{CR} \oplus R^{CR}) = nnz\,(L \oplus U)$, т. е. совпадение числа ненулевых элементов в факторных матрицах C, R и L, U, полученных методами CR и LU факторизации.

Для обеспечения корректности экспериментальных исследований максимально ослаблено влияние процедур управления расположением матричных элементов в массивах a, cnr и rnr. Прежде всего, размеры массивов выбраны равными $45 \cdot 10^6$, т.е. настолько большими, чтобы не возникало потребности инициировать работу специальных процедур «уборки мусора» в них [4, 5]. Кроме того, во всех тестах применена улучшенная обобщенная стратегия Марковица, где поиск ведущего элемента ограничивался множеством S_p ненулевых элементов, расположенных в p строках активной подматрицы с минимальным числом таких элеменов, а ведущим выбирался элемент a_{ij} с наименьшей ценой Марковица, но такой, абсолютное значение которого не более чем в τ раз меньше максимального по абсолютной величине элемента $a_{\max} \in S_p$.

Вычислительные эксперименты выполнены с матрицами, взятыми с веб-сайтов [9, 10]. Общие характеристики тестовых матриц и результаты экспериментирования с ними представлены в табл. 1 и 2, где

$\varepsilon = \sqrt{\sum_{z=1}^{n}(x_z - 1)^2 / n}$, $\delta T_F = \left(\frac{T_{LU-F}}{T_{CR-F}} - 1\right) 100\,\%$. В зависимости от тестируемой матрицы установлены следующие параметры p и τ: в тесте ASIC_680k $p = 100$ и $\tau = 0{,}0005$, в тесте mark3jac060 $p = n$ и $\tau = 0{,}001$; во всех остальных тестах $p = 1$ и $\tau = 1$.

Описанные условия проведения экспериментов позволили избежать инициализации процедур «уборки мусора» в массивах *a*, *cnr* и *rnr*. Однако в алгоритме, реализующем метод *LU* факторизации, применена одна из известных процедур перестановки строк и столбцов, минимизирующая объем требуемых для этого операций выборки-сравнения [11]. Такая процедура приводит не только к изменению значений индексов переставляемых строк и столбцов в массивах *cnr* и *rnr*, но и сопровождается перестановками отдельных элементов в тех же массивах, а таже в массиве

Таблица 1

Наименование теста	Размерность тестовой матрицы, n	Число ненулевых элементов в факторных матрицах		Ошибка ε	Время решения системы T_{CR}, с
		исходных $nnz\,(A)$	совмещенных $nnz\,(C \oplus R)$		
ASIC_680k	682862	3871773	8220972	4.57E-08	1024,531
ASIC_680ks	682712	2329176	6170719	9.51E-09	47,953
ASIC_320ks	321671	1827807	5082048	2.89E-12	54,875
scircuit	170998	958936	2408645	8.39E-11	2,328
circuit_4	80209	307604	707803	1.92E-09	1,359
bayer01	57735	277774	7283567	4.33E-08	40,453
mark3jac060	27449	170695	28775871	3.42E-11	2345,125
ex35	19716	228208	2474829	6.82E-08	7,360
poisson3Da	13514	352762	10697886	1.10E-13	162,281
circuit_3	12127	48137	76708	2.07E-12	0,141
cry10000	10000	49699	501518	4.04E-06	0,828
gemat11	4929	33185	77616	2.21E-13	0,047
lns_3937	3937	25407	568884	1.60E-12	1,719
psmigr_1	3140	543162	6534812	9.40E-13	122,531
orani678	2529	90158	336551	3.07E-15	0,469
adder_trans_01	1814	14579	20541	2.11E-16	0,016
orsirr_1	1030	6858	57892	1.42E-13	0,063
orsirr_2	886	5970	45146	1.37E-13	0,031

a. В результате перестановок элементов в массивах a, cnr и rnr их размещение на текущем шаге реализации метода LU факторизации становится отличным от размещения, наблюдаемого в случае реализации метода CR факторизации. Такие различия в размещении элементов усиливаются необходимостью размещения вновь возникающих ненулевых элементов, что порождает различные динамические процессы переразмещения элементов строк и столбцов в массивах a, cnr и rnr. Таким образом, в проведенных экспериментах удалось минимизировать расхождения в условиях реализации методов CR и LU факторизации насколько это было возможно, однако не удалось достичь их полной идентичности.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1. Затраты времени на осуществление перестановок строк и столбцов в активных подматрицах оказываются сопоставимыми с затратами времени

Таблица 2

Наименование теста	Затраты времени на				Относительное замедление факторизации δT_F, %
	численное решение		факторизацию		
	T_{CR-S}, с	T_{LU-S}, с	T_{CR-F}, с	T_{LU-F}, с	
ASIC_680k	0,172	0,156	1004,328	1539,047	53,2
ASIC_680ks	0,188	0,140	46,656	49,204	5,5
ASIC_320ks	0,171	0,141	54,875	59,921	9,2
scircuit	0,125	0,078	2,000	3,907	95,4
circuit_4	0,016	0,032	1,172	1,562	33,3
bayer01	0,094	0,094	39,062	51,563	32,0
mark3jac060	0,297	0,281	903,953	1106,750	22,4
ex35	0,047	0,031	7,016	10,578	50,8
poisson3Da	0,110	0,110	159,109	204,328	28,4
circuit_3	0,000	0,016	0,093	0,109	17,2
cry10000	0,000	0,016	0,781	1,171	49,9
gemat11	0,000	0,000	0,031	0,047	51,6
lns_3937	0,015	0,000	1,625	2,313	42,3
psmigr_1	0,063	0,063	120,437	147,562	22,5
orani678	0,016	0,000	0,437	0,656	50,1
adder_trans_01	0,000	0,000	0,015	0,016	6,7
orsirr_1	0,000	0,000	0,047	0,078	66,0
orsirr_2	0,000	0,000	0,047	0,063	34,0

на факторизацию матриц. Реализация перестановок в методе *LU* факторизации приводит к существенному замедлению вычислительного процесса в среднем на величину $\delta T_F = 37{,}3$ % для данного множества тестов.

2. Затраты времени на численное решение систем уравнений вида $C\langle P\rangle R\langle P\rangle X = B$, полученных методом *CR* факторизации, больше затрат времени на численное решение систем уравнений вида $LU\mathbf{X} = \mathbf{B}$, формируемых методом *LU* факторизации. Увеличение вычислительных затрат обусловлено особенностями алгоритмов решения систем уравнений вида $C\langle P\rangle\,\mathbf{V} = \mathbf{B}$ и $R\langle P\rangle\mathbf{X} = \mathbf{V}$ с нетреугольными матрицами $C\langle P\rangle$ и $R\langle P\rangle$. Однако суммарное время решения исходных систем уравнений составляет величину $T_F + T_S$, которая существенно больше в случае использования метода *LU* факторизации.

Выводы. В отличие от метода *LU* факторизации матриц с выбором ведущих элементов, где в общем случае обязательно выполняются операции перестановки строк и столбцов, метод *CR* факторизации матриц не требует выполнения таких операций, что ускоряет процесс факторизации. Ускорение оказывается особенно существенным в случае затрудненного доступа к матричным элементам, связанного с использованием специальных форматов размещения в массивах ненулевых элементов разреженных матриц.

Очевидно, метод *CR* факторизации матриц можно использовать не только как эффективный прямой метод решения больших систем уравнений, но и как метод быстрого построения предобусловливателей для итерационного решения систем [12—14]. В этом случае построение предобусловливателей посредством неполной *CR* факторизации матриц можно осуществлять без какого-либо перемещения ненулевых элементов в массивах.

Таким образом, предлагаемый метод *CR* факторизации матриц может быть положен в основу алгоритмов и программ ускоренного решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности.

New method of matrices column-row (*CR*) factorization is proposed. It is distinguished on principle from the known *LU* factorization method by property of adaptation to the dynamic selection of pivoting entries. It permits to refuse from the rows and columns permutation in the process of factor matrices calculation. The method advantage is confirmed by its testing results on the large-scale sparse matrices set. *CR* factorization method is preferable than *LU* factorization method by an accuracy of solution obtained and a memory volumes. It allows essentially to reduce the solution time for the large-scale sparse algebraic equation system (more than one third on the average).

1. www.cise.ufl.edu/reseach/sparse/codes/
2. www.srcc.msu.su/num_anal/lib_na/cat/cat552.htm
3. *Писанецки С.* Технология разреженных матриц. — М. : Мир, 1988. — 410 с.
4. *Эстербю О., Златев З.* Прямые методы для разреженных матриц. — М. : Мир, 1987. — 120 с.

5. *Икрамов Х. Д.* Вычислительные методы линейной алгебры. — М. : Знание, 1989. — 48 с.
6. D*avis T. A.* Direct Methods for Sparse Linear Systems. — Philadelphia. : SIAM, 2006. — 226 p.
7. *Самарский А. А., Гулин А.В.* Численные методы. — М. : Наука, 1989. — 432 с.
8. *Джордж А.. Лю Дж.* Численное решение больших разреженных систем уравнений. — М. : Мир, 1984. — 334 с.
9. www.cise.ufl.edu/reseach/sparse/matrices/index.html
10. http://math.nist.gov/MatrixMarket/matrices.html
11. www.netlib.org/y12m/index.html
12. *Saad Y.* Iterative Methods for Sparse Linear Systems. — Minneapolis : MN, 2000. — 448 p.
13. *Ортега Дж.* Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. — М. : Мир, 1991. — 386 с.
14. *Saukh S. Ye.* Incomplete Cholesky factorization in fixed memory // Parallel Proc. and Applied Mathematics: 5th International Conference, PPAM 2003, Czestochowa, Poland, September 7—10, 2003. Revised Papers. — Springer-Verlag Heidelberg : Lecture Notes in Computer Science. — 2004. — vol. 3019. — P. 1042—1051.

Поступила 19.04.07

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 мерности, математическое моделирование технологических процессов в энергетике и в газотранспортных системах, экономико-математические методы моделирования финансовых и макроэкономических процессов.