КОМПЬЮТЕРНАЯ
МАТЕМАТИКА

Математическое моделирование

Рассматриваются задачи решения прямоугольных СЛАУ и СЛАН с матрицами ограничений общего вида с помощью метода базисных матриц. Предлагается методика уточнения решения. Проведены вычислительные эксперименты, показывающие эффективность предложенных модификаций МБМ.

УДК 519.852:519.876

В.А. БОГАЕНКО, В.И. КУДИН, В.В. СКОПЕЦКИЙ

АНАЛИЗ КОМПЬЮТЕРНЫХ СХЕМ МЕТОДА БАЗИСНЫХ МАТРИЦ

Введение. Известно, что математический аппарат анализа линейных систем уравнений (СЛАУ) и неравенств (СЛАН), является основополагающим при проведении исследований более сложных нелинейных задач. Разработаны десятки точных методов и сотни итерационных методов решения СЛАУ. В общем случае нахождение их решений является одной из задач анализа линейной системы [1, 2].

При моделировании многих процессов движения жидкостей характерными проблемами являются: неадекватность процесса и математической модели, математической и машинной модели [3]; некорректность задачи; накопление ошибок округления, усечения и других в ходе вычислений [3–5] при реализации вычислительного метода и алгоритмов. Разработаны различные подходы, направленные на "смягчение" эффекта недостоверности вычислений: проведение вычислений с удвоенной точностью; включение процедур нормализации модели; проведение эквивалентных преобразований исходной модели с целью понижения обусловленности матрицы ограничений; построение вариантов выбора ведущего элемента (в методах типа Гаусса) [4–6]; методы и алгоритмы (типа SVD) разложения исходной матрицы ограничений [6]; использование математического аппарата интервального анализа [7]. Следует отметить, что наличие таких проблем в объекте исследования существенно понижают эффективность процедур нахождения двусторонних оценок границ компонент вектора решения (например, построения на основе метода простой итерации сжимающихся отображений для локализации неподвижной точки). Одним из вариантов улучшения параметров решения, в таких случаях, является уточнение найденного приближенного решения в конусе общих решений соответствующей СЛАН.

В данной работе на типовых моделях плохо обусловленных матриц ограничений СЛАУ, которые отражают (по структуре матрицы ограничений, обусловленности) особенности задач предметной области, построены методы и алгоритмы нахождения приближенного решения СЛАУ и на их основе, процедуры уточнения ранее найденного решения.

На стадии исследования дискретных аналогов (СЛАУ) математических моделей процессов, используется метод базисных матриц (МБМ) [8]. На основе положений МБМ построено алгоритмическое и программное обеспечение для проведения вычислительного эксперимента. Эксперимент проводился по нескольким направлениям:

– проверке эффективности МБМ и его алгоритмов нахождения решения, обратной матрицы и величины невязок с использованием (так и без использования) процедуры выбора главного элемента и уточнения решения;

– определение на моделях заданной размерности точности обращения матрицы и величины невязок при разных значениях числа обусловленности матрицы ограничений и машинного нуля;

– исследование зависимости точности нахождения решения и обращения матрицы от размерности модели, значения машинного нуля при фиксированном числе обусловленности матрицы ограничений;

– нахождение временных характеристик МБМ на моделях разной размерности.

На основе формул связи элементов метода в соседних решениях предложена итерационная процедура нахождения величины ранга матрицы ограничений и решения СЛАУ. Установлено условие единственности решений СЛАУ. При построении процедуры уточнения использована формула аналитического представления общих решений СЛАН с разным типом ограничений (в случае невырожденности матрицы ограничений).

Основные положения МБМ. Введем в рассмотрение СЛАУ вида

$$Au = C, \tag{1}$$

где матрица A (со строками $a_1, a_2, \ldots, a_m$, $a_j = (a_{j1}, a_{j2}, \ldots, a_{jm})$, $j = \overline{1,m}$) – квадратная матрица размерностью $(m \times m)$, в которой $u = (u_1, u_2, .., u_m)^T$, вектор ограничений $C = (c_1, c_2, ..., c_m)^T$ имеют размерность m.

Введем соответственно системе (1) изменением знака ″=″ на ″≤″ СЛАН вида

$$Au \le C. \tag{2}$$

При наличии целевой функции вида

$$f_1 = \max Bu, \tag{3}$$

модель приобретет вид задачи линейного программирования (1)–(3), в которой $B = (b_1, b_2, ..., b_m)$ – вектор целевой функции.

В основу МБМ положена идея базисной матрицы.

Определение 1. Матрицу $A_б$, составленную из m линейно независимых нормалей гиперплоскостей (ограничений (2)), будем называть искусственной базисной, а решение u_0 соответствующей ей системы уравнений $A_б u = C^0$, где $C^0 = (c_{i_1}, c_{i_2}, ..., c_{i_m})^T$, искусственным базисным.

Определение 2. Две базисных матрицы с отличной одной строкой будем называть смежными.

Базисные матрицы в ходе итераций последовательно изменяются вводом-выводом из нее нормалей ограничений задачи.

Введем в рассмотрение векторы $a_{i1}, a_{i2}, ..., a_{im}$ – нормали ограничений (в дальнейшем будем называть строками) $a_j u^T \le c_j$, $j \in J_б$, где $J_б = \{i_1, i_2, ..., i_m\}$ – индексы ограничений, нормали которых образовывают строки базисной матрицы $A_б$, a_l – нормаль ограничения $a_l u \le c_l$, $\alpha_l = (\alpha_{l1}, \alpha_{l2}, ..., \alpha_{lm})$ – вектор разложения вектора a_l по строкам базисной матрицы $A_б$.

Пусть e_{ri} – элементы матрицы $A_б^{-1}$, обратной к $A_б$, $u_0 = (u_{01}, u_{02}, ..., u_{0m})^T$ – базисное решение, $\alpha_r = (\alpha_{r1}, \alpha_{r2}, ..., \alpha_{rm})$ – вектор разложения нормали ограничения $a_r u \le c_r$ по строкам базисной матрицы $A_б$, $\alpha_0 = (\alpha_{01}, \alpha_{02}, ..., \alpha_{0m})$ вектор разложения нормали целевой функции (3) по строкам базисной матрицы $A_б$, $\Delta_r = a_r u_0 - c_r$ – невязка r-го ограничения в вершине.

Между коэффициентами разложения нормалей ограничений (1), целевой функции (3) по строкам искусственной базисной матрицы, элементами обратных матриц, базисными решениями, невязками ограничений (1) и значениями целевой функции в двух смежных базисных матрицах при замене $к$-й строки в базисной матрице $A_б$ строкой a_l имеют место связывающие соотношения [8].

Далее приведены основные стадии алгоритмической схемы нахождения величины машинного ранга, базисной матрицы и решения системы (2) на основе известных свойств тривиальной СЛАУ той же размерности:

– проводим симплексные итерации по замещению строк тривиальной базисной матрицы с известными элементами метода строками ограничений системы (4), согласно соотношениям [8];

– проверяем выполнение условий невырожденности на каждой итерации;

– находим соответствующие элементы метода: вектора разложения по строкам базисных матриц ограничений (2), обратную базисную матрицу, искусственные базисные решения $u_0^{(r)}$, где r – номер итерации;

– контролируем количество итераций r замещения строк вспомогательной системы строками основной системы (1) для которых выполняются условия невырожденности.

Если количество итераций, для которых $\alpha_{lk}^{(i)} \neq 0$, равно m, находим единственное решение из соотношения: $A_б^{-1} \cdot c^0 = u^0$. В противном случае при выполнении условия $r < m$ для СЛАУ (4) не выполняется условие единственности решения. Модель требует дальнейшего анализа разрешимости задачи.

Свойства общих решений СЛАН. На основе формул связи элементов метода в смежных базисных матрицах можно получить аналитические представления общих решений соответствующей системы линейных алгебраических неравенств (СЛАН) с разным типом ограничений в случае невырожденности матрицы ограничений. Также можно проанализировать влияние количественных изменений в элементах модели на величину ранга и свойства матрицы ограничений.

Построение общего решения СЛАН (2) основывается на свойствах решения соответствующей СЛАУ (1).

Теорема 1. Общее решение СЛАН (2) ранга m является конус K_U с острием u_0 – решением СЛАУ(1) и образующими $e_i = (A_б^{-1})_i$, $i = \overline{1,m}$, который представляется соотношением

$$K_U = \left\{ u \,/\, u = u_0 - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i e_i ,\ \lambda_i > 0 \right\}. \tag{4}$$

Доказательство приведено в [8].

Рассмотренная методология может быть применена для анализа соответствующих моделей линейного программирования (МЛП) и для решения ряда других задач. В частности, на основе формул связи элементов метода в смежных базисных матрицах можно анализировать величину ранга матрицы ограничений, а также уточнять найденное решение СЛАУ.

Далее рассмотрено применение МБМ для уточнения ранее найденного решения.

Процедура уточнения приближенного решения. Известно, что одной из причин неадекватности представления математической модели в виде машинной, наряду с накопленными ошибками в ходе вычислений, является усечение длины мантиссы при представлении чисел с плавающей точкой. Это приводит к ненулевой невязке найденного решения. Возникает необходимость в уточнении найденного решения на основе полученного ранее, например, с помощью МБМ.

Пусть в результате проведения основных итераций найдено решение: $\tilde{u}_0 = (\tilde{u}_{01}, \tilde{u}_{02}, \dots, \tilde{u}_{0m})$, $\tilde{\Delta} = (\tilde{\Delta}_1, \tilde{\Delta}_2, \dots, \tilde{\Delta}_m)$, $\tilde{A}_б^{-1}$, где $A\tilde{u}_0 - C = \tilde{\Delta}$ невязки ограничений, причем $\exists i \in I,\ \Delta_i \neq 0$.

Элементы решения можно интерпретировать, как нахождение точного решения некоторой возмущенной СЛАУ $\tilde{A}_б u = \tilde{c}_б$ с матрицей $\tilde{A}_б$, которая обладает свойством $\tilde{A}_б \times \tilde{A}_б^{-1} = E$, $\tilde{c}_б = \tilde{A}_б \tilde{u}_0$. Проведем преобразования строк исходной матрицы (нормалей) ограничений

$$A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \dots \\ a_m \end{pmatrix} \text{ в } A_б = \begin{pmatrix} \tilde{a}_1 \\ \tilde{a}_2 \\ \dots \\ \tilde{a}_m \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ c_m \end{pmatrix} \text{ в } \tilde{C}_б = \begin{pmatrix} \tilde{c}_1 \\ \tilde{c}_2 \\ \dots \\ \tilde{c}_m \end{pmatrix},$$

$$(\tilde{\Delta} = (\tilde{\Delta}_1, \tilde{\Delta}_2, \dots, \tilde{\Delta}_m) \text{ в } \Delta = (\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_m),\ \Delta_i < 0,\ i \in I).$$

Если для i-го ограничения (2) выполнено условие $\tilde{\Delta}_i > 0$, то проведем преобразования $\tilde{a}_i = -a_i$, $\tilde{c}_i = -c_i$, $\Delta_i = -\tilde{\Delta}_i$, $C_б = (c_1, c_2, \dots, c_m)^T$, в противоположном случае компоненты оставим без изменений.

Введем в рассмотрение вектор $\tilde{u} = -\Delta \times A_б$ и следующую задачу линейного программирования

$$f_2 = \max\ \tilde{u}u, \tag{5}$$

$$A_б u \le C_б, \tag{6}$$

$$\tilde{A}_б u \le \tilde{c}_б. \tag{7}$$

Следует отметить, что оптимизационная задача разрешима, поскольку для $\tilde{u}_0 = (\tilde{u}_{01}, \tilde{u}_{02}, \dots, \tilde{u}_{0m})$, $\Delta_i \le 0,\ i \in I$. Для нее справедливы следующее утверждение и теорема.

Утверждение 1. При невырожденности матрицы $A_б$, общим решением (6) является конус K_{u_0} (образующие – столбцы матрицы $A_б^{-1}$, острие $u_0 = (u_{01}, u_{02}, \dots, u_{0m})$ – решения соответствующей СЛАУ, причем целевая функция (5) достигает на острие конуса максимального значения.

Доказательство утверждения следует из теоремы 1. Для решения $u_0 = (u_{01}, u_{02}, \dots, u_{0m})$ задачи (5)–(6) выполняется условие

$\alpha_0 = (\alpha_{01}, \alpha_{02}, \dots, \alpha_{0m}) = -\tilde{u}A_б^{-1} = -\Delta \times A_б \times A_б^{-1} = -\Delta \ge 0$, которое является условием оптимальности.

Теорема 2. Если $u_0 \in K_{\tilde{u}_0}$ (решение (7)), то оно оптимальное для (5)–(7) и точное решение для СЛАУ (1).

Если $u_0 \notin K_{\tilde{u}_0}$ (не является решением (7)), то оптимальное решение задачи (5)–(7) определяет промежуточное решение (1), которое является уточнением решения $\tilde{u}_0$.

Методика вычислительного эксперимента. Для проведения тестирования свойств метода, алгоритмов нахождения решения и обратной матрицы было разработано алгоритмическое и программное обеспечение. Программные модули, реализующие рассмотренные алгоритмы, написаны на языке С++ и интегрированы в систему САРПОК3D [9]. Использованная для тестирования аппаратная платформа – процессор AMD Athlon64 с реальной тактовой частотой 1.8Ghz, 512 Mb оперативной памяти.

Для вычислительного эксперимента были выбраны модели систем линейных алгебраических уравнений со 100 % заполнением матрицы ограничений. Генерировались системы полного ранга с заполненной матрицей вида

$$A = \begin{cases} a_i = (rnd(1.0), ..., rnd(1.0)),\ i = 0 \\ a_i = a_{i-1} + \dfrac{\alpha}{n}(rnd(1.0), ..., rnd(1.0)),\ i > 0, \end{cases}$$

где $\| a_i - a_j \|^2 < \alpha$.

Проводилось три типа тестов:

1) определялась невязка решения и точность обращения различными алгоритмами для матриц размерностью 256 x 256: с различными значениями α и машинного нуля ε (без использования процедуры выбора главного элемента и уточнения решения);

2) исследовалась зависимость невязки и быстродействия от размерности задачи при $\alpha = 10^{-4}$ и $\varepsilon = 10^{-12}$;

3) исследовалась эффективность процедур уточнения решения и выбора главного элемента при вычислении невязки решения и точности обращения матрицы ограничений различными алгоритмами для матриц размерностью 256 x 256 с различными значениями α и машинного нуля ε.

Рассматривались два алгоритма метода базисных матриц:

– BM-I ($C_0^* = I$) – алгоритм с единично-диагональной начальной базисной матрицей;

– BM-R ($C_0^* = rand(0,1)$) – алгоритм с начальной базисной матрицей, заполненной случайными числами.

Результаты вычислительного эксперимента. Из серии тестов 1) (табл. 1) можно сделать следующие выводы:

– при $\alpha < 10^{-4}$ метод базисных матриц дает машинно-точное решение за наименьшее время;

– при $\alpha = 10^{-4}$ метод базисных матриц имеет допустимые погрешности решения;

– при $\alpha > 10^{-4}$ не дает допустимые погрешности решения.

В среднем, для обоих алгоритмов, уменьшение коэффициента α на 2 порядка приводит к снижению точности на 4 порядка.

Под машинно-точным решением для вычислений с плавающей запятой двойной точности понимается решение, значение максимальной невязки которого меньше 10^{-12}. Под допустимыми погрешностями – значение невязки в диапазоне от 10^{-12} до 10^{-5}. Решения с невязкой $>10^{-5}$ считаются неверными.

Решения, получаемые алгоритмом BM-R, во всех тестах худшие по критерию точности, чем получаемые алгоритмом BM-I. К тому же, быстродействие первого алгоритма ниже. В дальнейшем под методом базисных матриц понимается алгоритм BM-I.

Серия тестов 2) (табл. 2, 3.) показывает зависимость точности решения от размерности матриц. Для матриц размерностью n>1000, при увеличении размерности на 1000 элементов точность падает на порядок для всех алгоритмов. В табл. 4 приведены результаты по тестированию времени (в мс) работы алгоритмов МБМ для квадратных матриц ограничений.

ТАБЛИЦА 1. Невязки решения в зависимости от значения машинного нуля

Метод	Максимальные невязки при машинных нулях			
	1.00E-08	1.00E-10	1.00E-12	1.00E-14
α=1.00E-02				
BM-I	1.19749e-013	6.21815e-013	7.38705e-015	6.88064e-012
BM-R	1.7837e-010	1.05435e-008	3.01975e-010	1.2352e-009
α=1.00E-03				
BM-I	1.7854e-011	5.50958e-010	1.30243e-010	3.03231e-011
BM-R	7.37512e-007	1.15638e-007	1.27955e-009	6.03063e-010
α=1.00E-04				
BM-I	2465.61	0.000146138	2.58376e-008	3.11594e-010
BM-R	356603	5.43382e-007	1.74224e-005	2.11747e-006
α=1.00E-05				
BM-I	169414	693968	0.000111571	3.56436e-006
BM-R	162248	0.000943858	0.023773	7.2919e-006

ТАБЛИЦА 2. Невязки решения в зависимости от размерности задачи

	α	BM-I		
N	1	1.00E-02	1.00E-04	1.00E-06
1000	7.59E-16	1.02E-12	1.37E-08	0.004137
2000	1.25E-15	5.93E-12	6E-07	5897
3000	1.24E-13	2.1E-09	0.013045	1.007973
4000	5.09E-11	1.55E-07		
5000	1.27E-10	2.03E-07		

ТАБЛИЦА 3. Невязки решения в зависимости от размерности задачи

	α	BM-R		
N	1	1.00E-02	1.00E-04	1.00E-06
1000	7.37E-13	1.08E-09	8.73E-06	0.553564
2000	7.66E-12	2.25E-06	0.000283	4.76763
3000	4.85E-09	3.38E-05	0.131495	174.57
4000	2.79E-10	3.86E-06		
5000	1.6E-08	0.000477		

ТАБЛИЦА 4. Время работы алгоритмов

N	BM-I	BM-R
1000	5060	6780
1500	16720	22590
2000	40150	54430
2500	78680	106950
3000	137000	186840

Вычислительная сложность обоих тестированных алгоритмов – $O(n^3)$.

Серия тестов 2) состояла в проведении эксперимента по тестированию процедуры уточнения решения СЛАУ, полученной при дискретизации методом функций Грина следующей краевой задачи:

$$D\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 H}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 H}{\partial z^2}\right)+\frac{\partial H}{\partial x}=0,\quad (x,y,z)\in\Omega=\{0\le x\le 1,\quad 0\le y\le 1,\quad 0\le z\le 1\},$$

$$H\big|_{\Gamma_1}=1,\ \frac{\partial H}{\partial \vec{n}}\bigg|_{\Gamma_2}=0,\ \Gamma_1=\{x=0,\ 0\le y\le 1,\ 0\le z\le 1\},\ \Gamma_2=\Gamma(\Omega)-\Gamma_1,$$

где $\Gamma(\Omega)$ – граница области Ω, D – варьируемый коэффициент конвективной диффузии.

Здесь при уменьшении параметра D обусловленность матрицы существенно падает. Для этой задачи проводилось сравнение точности полученного решения методом базисных матриц с (и без) использования процедуры уточнения решения. Полученные значения невязки решения приведены в табл. 5. Значения максимального и минимального расстояния между строками матриц $\| a_i - a_j \|$ $\min\alpha$, $\max\alpha$ приведены в табл. 6. Допустимым решением считалось решение с невязкой $\varepsilon < 10^{-4}$.

ТАБЛИЦА 5. Невязка решения СЛАУ

Алгоритм	БМ (№ итерации)			
D	1	2	3	4
1	1.26684e-006	4.56585e-010	5.29279e-010	5.29279e-010
0,1	0.00228699	1.50172e-007	1.82447e-007	1.82447e-007
0,05	0.00675934	7.17727e-006	5.82492e-006	8.8568e-006
0,025	1071.5	0.10663	0.105179	0.1155
0,015	17032.2	0.317572	0.42029	0.233579

ТАБЛИЦА 6. Характеристики матриц

D	$\min\alpha$	$\max\alpha$
1	0.0013667	48.9676
0,1	3,8811	434950
0,05	21.8713	6.15539e+006
0,025	288.497	9.53489e+007
0,015	2040.47	7.06335e+008

Из полученных результатов можно сделать вывод, что для матриц полного ранга достаточно проведения одной итерации уточнения, а все дальнейшие итерации существенно не изменяют точность. Для матриц, ранг которых был определен как неполный, достаточно одной итерации уточнения после того как был достигнут максимальный машинный ранг.

В дальнейшем предполагается проведения работы по улучшению свойств процедуры уточнения найденного приближенного решения.

Особенности исследования СЛАУ на основе МБМ. МБМ является релаксационным методом, поскольку: на каждом шаге в процесс вычислений включается одно ограничение; нормали ограничений СЛАУ (1) последовательно замещают нормали тривиальной СЛАУ; начальные обратная матрица и решение для (1) являются заданными; найденное приближенное решение может быть улучшено применением процедуры уточнения; структурно прямая и обратные смежные матрицы являются эквивалентными; объем вычислений по замещению нормалями ограничений (1) постепенно возрастает, причем максимальное количество шагов по нахождению ранга системы при её невырожденности ограничивается числом m. Метод может находить число обусловленности как промежуточных, так и конечной базисных матриц. Идеология симплексных преобразований может быть применена для анализа вырожденности матрицы ограничений, величины машинного ранга и решения СЛАУ (1) при возмущении ее элементов.

В.О. Богаєнко, *В.І. Кудін*, *В.В. Скопецький*

АНАЛІЗ КОМП'ЮТЕРНИХ СХЕМ МЕТОДУ БАЗИСНИХ МАТРИЦЬ

Розглядаються задачі розв'язання прямокутних СЛАР і СЛАН з матрицями обмежень загального вигляду за допомогою методу базисних матриць. Пропонується методика уточнення розв'язку. Проведені обчислювальні експерименти, які показують ефективність запропонованих модифікацій МБМ.

V.O. Bohaienko, *V.I. Kudin*, *V.V. Skopetskyj*

ANALYSIS OF COMPUTATIONAL SCHEMES FOR BASIC MATRIX METHOD

Solution to general rectangular linear algebraic systems of equations and inequalities using basic matrix method is considered. Solution refinement method is proposed. Numerical experiments, which demonstrate the efficiency of the proposed BMM modifications are made.

1. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы / Гл. ред. физико-математической литературы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
2. *Воеводин В.В.* Вычислительные основы линейной алгебры / Гл. ред. физико-математической литературы. – М.: Наука. – 1977. – 303 с.
3. *Химич А.М., Молчанов И.Н.* и др. Численное программное обеспечение интеллектуального мини-компьютера Инпарком. – Киев: Наук. думка, 2007. – 220 с.
4. *Деммель Дж.* Вычислительная линейная алгебра // Теория и приложение. – М.: Мир, 2001. – 430 с.
5. *Уилкинсон Дж.* Алгебраическая проблема собственных значений. – М.: Наука, 1970. – 564 с.
6. *Беклемишев Д.В.* Дополнительные главы линейной алгебры. – М.: Наука, 1983. – 335 с.
7. *Кулиш У., Рац Д., Хаммер Р., Хокс М.* Достоверные вычисления // Базовые численные методы. – Москва-Ижевск, 2005. – 496 с.
8. *Кудін В.І., Ляшко С.І., Яценко Ю.П., Хритоненко Н.В.* Метод штучних базисних матриць // Доп. НАН України. – 2007. – **9**. – С. 30–34.
9. *Скопецкий В.В., Стоян В.А., Благовещенская Т.Ю., Богаенко В.А.* Программный комплекс моделирования динамики систем с распределенными параметрами // Управляющие системы и машины. – 2006. – № 2. – С. 32–41.

Получено 12.05.2009

Об авторах:

Богаенко Всеволод Александрович,
кандидат технических наук, научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,

Кудин Владимир Иванович,
доктор технических наук, старший научный сотрудник
Киевского национального университета имени Тараса Шевченко,

Скопецкий Василий Васильевич,
доктор физико-математических наук,
член-корреспондент НАН Украины,
заведующий отделом Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины.