

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

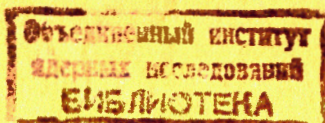
C179

P11-84-493

4450/84

П.Г.Акишин

GAUSS-ПРОГРАММА
РЕШЕНИЯ БОЛЬШИХ ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ
УРАВНЕНИЙ
С ВЫХОДОМ НА ВНЕШНИЕ УСТРОЙСТВА



1984

Многие задачи математической физики приводят к необходимости решения линейных систем уравнений. Ситуация, когда матрица системы помещается в оперативной памяти ЭЕМ, достаточно хорошо изучена, существует большой набор методов и алгоритмов решения^{/1-3/}.

В данной работе предлагается алгоритм решения линейных систем в случае, когда матрица не помещается в оперативной памяти. Предполагается, что матрица хранится на внешних устройствах (диски, магнитные ленты и т.д.), и есть возможность как считывания элементов первоначальной матрицы, так и записи промежуточных результатов.

При разработке алгоритма использовался метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу^{/2/}. Этот метод, с одной стороны, позволяет минимизировать число обменов с внешними устройствами ЭЕМ и, с другой стороны, достаточно устойчив к ошибкам округления. Математическая сторона вопроса подробно изложена в^{/2/}. Предлагаемый алгоритм реализован на языке ФОРТРАН.

Описание программы GAUSS

Пусть необходимо решить систему линейных уравнений

$$B\bar{x} = \bar{c}, \quad (1)$$

где B - квадратная матрица размера $[NDIM \times NDIM]$, \bar{c} , \bar{x} - векторы размерности $NDIM$.

Для работы с подпрограммой решения линейных уравнений GAUSS необходимо в главной программе заказать два файла TAPE1 на устройстве внешней памяти с номером 1 и TAPE2 - на устройстве с номером 2. Матрица B из (1) записывается в файл TAPE1 следующим образом. Заказывается буферный массив A длиной LB . Массив A заполняется столбцами матрицы B последовательно.

В ячейках с $A(1)$ по $A(NDIM)$ помещается первый столбец матрицы B , с $A(NDIM+1)$ по $A(2 \cdot NDIM)$ - помещается второй столбец и т.д. Пусть NQ - число столбцов, которые помещаются в массиве A . Массив A записывается на файл TAPE1 оператором фортрана

WRITE(1) (A(k) , k=1 , LB)

После этого процедура повторяется: записываются с (NQ+1) по 2NQ столбцы и т.д., пока не будет записана вся матрица. Если NDIM не кратно NQ , то в последний раз в массив A будет помещено меньшее число столбцов, тем не менее запись в файл TAPE1 будет производиться тем же самым оператором. Обращаться к подпрограмме необходимо оператором

CALL GAUSS(LB,NDIM,NQ,A,A1,IJJ,C,X,JOB)

Параметры подпрограммы GAUSS:

- NDIM - размерность решаемой системы уравнений,
 A,A1 - рабочие массивы длиной LB каждый, используются как обменные буферы,
 LB - длины буферов A,A1;
 IJJ - целочисленный рабочий массив длины, не меньшей NDIM; в нем хранится вектор перестановок строк матрицы,
 C - массив длиной, не меньшей NDIM , он содержит правую часть системы уравнений;
 X - массив длиной, не меньшей NDIM , в нем помещается решение системы;
 NQ - параметр, который использовался при записи матрицы в файл TAPE1
 JOB - код операции, принимает три значения 1,2,3.

В случае, когда обращение к программе GAUSS проводится с JOB=1 , производится факторизация матрицы, запись факторизованной матрицы на устройство с номером 2, решение системы уравнений с правой частью C (решение при этом помещается в X). Если матрица B - невырожденная и процесс решения проходит до конца, JOB присваивается значение 2. Если матрица B - вырожденная, дается предупредительная диагностика, и JOB присваивается значение 3. При обращении к программе GAUSS правая часть C портится.

В случае, когда матрица факторизована, для решения системы уравнений с другими правыми частями необходимо JOB присвоить значение 2, а правую часть системы (I) заслать в массив C .

Алгоритм решения системы состоит из двух частей. В первой части проводится факторизация матрицы, т.е. находятся такие левая треугольная матрица S и правая треугольная матрица R , что

$$B = S^{-1}R ,$$

причем матрица S имеет единичную главную диагональ. Во второй части производится умножение вектора \bar{b} из (I) последовательно на матрицы S и R^{-1} , что эквивалентно решению системы уравнений.

В таблице приведены счетные времена, затрачиваемые на решение систем линейных уравнений на машине CDC-6500 , для матриц различной размерности. Длина буфера LB бралась равной 16800.

Таблице

Размерность системы уравнений	Время на факторизацию матрицы в с	Время на определение решения по уже факторизованной матрице в с
200	45.519	4.007
400	359.171	16.325
600	1219.961	39.039

Для сравнения приведем расчет системы уравнений 400-го порядка на ЭВМ БЭСМ-6. При длине буфера (LB), равной 10000, счетное время, затраченное на факторизацию матрицы и решение системы уравнений по факторизованной матрице, составило 18 мин 21 с .

Автор глубоко признателен А.П.Сапожникову за большую помощь при оформлении текста программы и постановке ее на ЭВМ БЭСМ-6, А.А.Корнейчуку за ряд ценных замечаний по изложению материала.

Литература

1. Фаддеев Р.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз, 1960.
2. Уилкинсон Д.Х. Алгебраическая проблема собственных значений. "Наука", М., 1970.
3. Уилкинсон, Райнш. Справочник алгоритмов на языке Алгол. Линейная алгебра. "Машиностроение". М., 1976.

ПРИЛОЖЕНИЕ

```

SUBROUTINE GAUSS(LB,NDIM,NQ,A,A1,IJJ,C,X,JOB)
C*
C*
C* ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
C* ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ
C* ДУБНА, 1984
C*
C*
C* GAUSS - ПРОГРАММА РЕШЕНИЯ ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ
C* УРАВНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГАУССА С ВЫБОРОМ
C* ГЛАВНОГО ЭЛЕМЕНТА ПО СТОЛБЦУ
C* В * X = C
C* МАТРИЦА A ХРАНИТСЯ В ФАЙЛЕ TARE1 .
C*
C* NDIM - РАЗМЕРНОСТЬ СИСТЕМЫ.
C*
C* A , A1 - РАБОЧИЕ МАССИВЫ ДЛИНОЙ LB КАЖДЫЙ.
C*
C* LB - ДЛИНЫ БУФЕРОВ A , A1 .
C*
C* IJJ - РАБОЧИЙ МАССИВ ДЛИНОЙ NDIM , В НЕМ
C* ХРАНИТСЯ ВЕКТОР ПЕРЕСТАНОВОК.
C*
C* C - МАССИВ ДЛИНОЙ NDIM ,СОДЕРЖИТ ПРАВУЮ ЧАСТЬ
C* СИСТЕМЫ.
C*
C* X - МАССИВ ДЛИНОЙ NDIM ,В НЕГО ПОМЕЩАЕТСЯ
C* РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ.
C*
C* JOB - КОД ОПЕРАЦИИ 1, 2.
C*
C* JOB =1 ФАКТОРИЗАЦИЯ МАТРИЦЫ В ,Т. Е.
C* ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МАТРИЦЫ В В ВИДЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ
C* ОБРАТНОЙ К ЛЕВОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ МАТРИЦЫ S НА
C* ПРАВУЮ ТРЕУГОЛЬНУЮ МАТРИЦУ R .
C* ФАКТОРИЗОВАННАЯ МАТРИЦА ЗАПИСЫВАЕТСЯ НА ФАЙЛ
C* TARE2 . ПРОВЕДИТСЯ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЯ
C* С ПРАВОЙ ЧАСТЬЮ C .
C* ЕСЛИ СИСТЕМА НЕВЫРОЖДЕННАЯ , JOB ПРИСВАЕВАЕТСЯ
C* ЗНАЧЕНИЕ 2.
C* ЕСЛИ СИСТЕМА ВЫРОЖДЕННАЯ , JOB ПРИСВАЕВАЕТСЯ
C* ЗНАЧЕНИЕ 3, ДАЕТСЯ ПРЕДУПРЕДИТЕЛЬНАЯ ДИАГНОСТИКА.
C*
C* JOB =2 РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ ПО УЖЕ ФАКТОРИЗОВАННОЙ
C* МАТРИЦЕ. ИСПОЛЬЗУЕТСЯ МАССИВ IJJ ,ПОЛУЧЕННЫЙ
C* В ХОДЕ ФАКТОРИЗАЦИИ. ПРАВая ЧАСТЬ C НЕ
C* СОХРАНЯЕТСЯ. ПЕРВОНАЧАЛЬНАЯ МАТРИЦА И
C* ФАКТОРИЗОВАННЫЕ МАТРИЦЫ СОХРАНЯЮТСЯ НА ФАЙЛАХ
C* TARE1 И TARE2 .
C* DIMENSION A(LB),A1(LB),IJJ(NDIM),C(NDIM),X(NDIM)
C* JOB =2 ПРОГРАММА СРАЗУ ПРИСТУПАЕТ К РЕШЕНИЮ
C* СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ.
C* IF(JOB.EQ.2)GO TO 17
C* ФАКТОРИЗАЦИЯ МАТРИЦЫ.
C*
C*
C* ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАШИННОГО НУЛЯ.
C* EPS=1.
C* 1 EPS1=EPS*0.5
C* IF(EPS1.EQ.0.)GO TO 2
C* EPS=EPS1
C* GO TO 1

```

```

2 CONTINUE
REWIND 1
NQ=NDIM
KQ=1Q
KTQ=NQ
IF(KQ.GT.NQ)KQ=NQ
IF(KTQ.GT.NQ)KTQ=NQ
C* ПЕРВОНАЧАЛЬНАЯ НУМЕРАЦИЯ СТРОК.
DO 3 K=1,NQ
3 IJJ(K)=K
NUMB=3
LLL J=J
C* ЧТЕНИЕ ПЕРВЫХ СТОЛБЦОВ МАТРИЦЫ.
READ(1) (A(LK),LK=1,LB)
REWIND 2
GO TO 9
4 CONTINUE
C* ПРОВЕДЕНИЕ С ЭЛЕМЕНТАМИ СЧЕРЕДНЫХ
C* СТОЛБЦОВ ДЕЙСТВИЙ,КОТОРЫЕ
C* ВЫПОЛНЯЮТСЯ СО СТРОКАМИ
C* МАТРИЦЫ К ДАННОМУ МОМЕНТУ.
IF(NUMB.EQ.4)GO TO 15
IF(NUMB+KQ.GT.NQ)KTQ=NQ-NUMB
READ(1) (A(LK),LK=1,LB)
REWIND 2
KKJ=J
DO 5 K1=1,LLLQ
READ(2) (A1(LK),LK=1,LB)
NDIF=-Nj
DO 5 K2=1,KQ
NDIF=NDIF+Nj
KKJ=KKJ+1
KK1=KKJ+1
KK5=IJJ(KKQ)
NNN1=-Nj
DO 7 K3=1,KTQ
NNN1=NNN1+Nj
R1=A(NNN1+KK5)
DO 3 K4=KK1,NQ
I1=IJJ(K4)
8 A(NNN1+I1)=R1*A1(NDIF+I1)+A(NNN1+I1)
7 CONTINUE
6 CONTINUE
5 CONTINUE
9 CONTINUE
C*
C* ОБРАБОТКА СЧЕРЕДНЫХ СТОЛБЦОВ МАТРИЦЫ.
NDIF=-Nj
DO 10 K1=1,KTQ
NUMB=NUMB+1
NDIF=NDIF+Nj
KK1=NUMB+1
IF(KK1.GT.Nj)GO TO 10
C* ПОИСК ГЛАВНОГО ЭЛЕМЕНТА В СТОЛБЦЕ.
IMAX=NUMB
RMAX=ABS(A(NDIF+IJJ(NUMB)))
DO 11 K2=KK1,NQ
IF(ABS(A(NDIF+IJJ(K2)))>.LE.RMAX)GO TO 11
IMAX=K2
RMAX=ABS(A(NDIF+IJJ(IMAX)))
11 CONTINUE

```



```

C* ПЕРЕСТАНОВКА СТРОК МАТРИЦЫ.
  K7=IIJ(IIMAX)
  I1=IIJ(NUMB)
  IIJ(NUMB)=K7
  IIJ(IIMAX)=I1
C* ПРОВЕРКА МАТРИЦЫ НА ВЫРОЖДЕННОСТЬ.
  IF(ABS(A(NDIF+K7)).LT.EPS)GO TO 16
C* ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ТРЕУГОЛЬНЫХ МАТРИЦ ,
C* ВХОДЯЩИХ В РАССМАТРИВАЕМЫЕ СТОЛБЦЫ.
  RMAX=-1./A(IIDIF+K7)
  DO 12 K2=KK1,NC
  K5=IIJ(K2)+NDIF
  12  A(K5)=A(K5)*RMAX
  IF(K1.EQ.KT)GO TO 1,
  KK2=K1+1
  NNN1=NDIF
  DO 13 K3=KK2,KT3
  NNN1=NNN1+1
  R1=A(NNN1+K7)
  DO 14 K4=KK1,NC
  I1=IIJ(K4)
  14  A(I1I1+I1)=A(NNN1+I1)+R1*A(NDIF+I1)
  13  CONTINUE
  12  CONTINUE
C* ЗАПИСЬ ЭЛЕМЕНТОВ ТРЕУГОЛЬНЫХ МАТРИЦ ,
C* ВХОДЯЩИХ В РАССМАТРИВАЕМЫЕ СТОЛБЦЫ.
  WRITE(2) (A(LK),LK=1,LR)
  LLL)=LLL+1
  GO TO 4
  15  CONTINUE
  GO TO 17
  16  CONTINUE
C* МАТРИЦА ВЫРОЖДЕННАЯ.
  200  FORMAT(1X,'DETERMINANT IS ZERO')
  PRINT 200
  JOB=3
  RETURN
  17  CONTINUE
C* РЕШЕНИЕ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ С ФАКТОРИЗОВАННОЙ
C* МАТРИЦЕЙ.
  REWIND 2
  NUMB=1
  KT3=ND
  IF(KT3.EQ.N)KT3=N
  NNN1=1+(KT3-1)
  18  CONTINUE
  IF((NUMB+ND).GT.ND)KT3=N-NUMB
  READ(2) (A(LK),LK=1,LE)
  NDIF=-ND
  DO 20 K1=1,KT3
C* УМНОЖЕНИЕ ПРАВОЙ ЧАСТИ НА МАТРИЦУ , ОБРАТНУЮ
C* К ЛЕВОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ.
  NDIF=NDIF+N
  NUMB=NUMB+1
  KK1=NUMB+1
  IF(KK1.EQ.N)GO TO 21
  R1=C(IIJ(NUMB))
  DO 19 K2=KK1,NC
  I1=IIJ(K2)
  19  C(I1)=C(I1)+R1*A(NDIF+I1)
  20  CONTINUE

```

```

  IF(NUMB.NE.13)GO TO 18
C* ОБРАЩЕНИЕ ПРАВОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ МАТРИЦЫ.
  21  CONTINUE
  I1=IIJ(NUMB)
  X(NUMB)=C(I1)/A(NDIF+I1)
  KK1=NUMB-1
  R1=X(NUMB)
  IF(KK1.EQ.3)GO TO 23
  DO 22 K1=1,KK1
  I1=IIJ(K1)
  22  C(I1)=C(I1)-A(NDIF+I1)*R1
  23  CONTINUE
  NUMB=NUMB-1
  NDIF=NDIF-ND
  IF(NDIF.GE.3)GO TO 21
  IF(NUMB.EQ.3)GO TO 24
  BACKSPACE 2
  BACKSPACE 2
  READ(2) (A(LK),LK=1,LR)
  NDIF=NDIF-1
  GO TO 21
  24  CONTINUE
  JOB=2
  RETURN
  END

```


НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Акишин П.Г. P11-84-493

GAUSS-программа решения больших линейных систем уравнений с выходом на внешние устройства

В работе дано описание программы решения больших линейных систем уравнений. В основу положен метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу. Приводится текст программы на фортране. Проведены тестовые расчеты.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Akishin P.G. P11-84-493

GAUSS-Program for Solving a Large Linear Systems Using External Devices

A program for solving a large linear systems is described. The Gauss method for pivot element elimination in a column is used. The FORTRAN listing of program is given. The results of test calculation are discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR,

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984