

Сравнение программных реализаций методов решения СЛАУ в задаче нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной гетерогенной системы

П. А. Сеченов, И. А. Рыбенко

Сибирский государственный индустриальный университет (СибГИУ), г. Новокузнецк

Аннотация: В статье представлен сравнительный анализ быстродействия программных реализаций численных методов при решении задачи нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной гетерогенной системы. Задача нахождения равновесного состава системы подразделяется на следующие подзадачи: 1) учет ограничений (метод Лагранжа); 2) нахождение функции максимума нелинейной функции: 2.1) преобразование функции в систему линейных уравнений (метод Ньютона – Рафсона); 2.2) использование численных методов для решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Аналитический обзор литературных данных показал, что при решении систем линейных алгебраических уравнений градиентные методы имеют лучшее быстродействие. Поэтому в статье сравнивалось быстродействие программной реализации всего алгоритма при использовании прямых (Гаусса, LUP-разложение) и итерационных методов (метод сопряженных градиентов, метод стабилизированных бисопряженных градиентов) решения системы линейных алгебраических уравнений. Также было проведено сравнение скорости вычисления разработанной программы с использованием динамически подключаемых библиотек Alglib, ILNumerics, MathNet, Accord для решения СЛАУ в задаче нахождения равновесного состава термодинамической системы.

Ключевые слова: равновесный состав, программная реализация, численные методы, метод сопряженных градиентов, метод стабилизированных бисопряженных градиентов, быстродействие, динамически подключаемые библиотеки.

Для цитирования: Сеченов П. А., Рыбенко И. А. Сравнение программных реализаций методов решения СЛАУ в задаче нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной гетерогенной системы // Вестник СибГУТИ. 2024. Т. 18, № 3. С. 86–98. <https://doi.org/10.55648/1998-6920-2024-18-3-86-98>.



Контент доступен под лицензией
Creative Commons Attribution 4.0
License

© Сеченов П. А., Рыбенко И. А., 2024

Статья поступила в редакцию 11.01.2024;
переработанный вариант – 25.02.2024;
принята к публикации 02.04.2024.

1. Введение

Одной из важных задач во многих областях науки является определение области допустимых значений термодинамических функций и параметров сложных многокомпонентных термодинамических систем, в которых изменения состояния сопровождаются фазовыми, полиморфными и химическими превращениями. Решить такую задачу можно только на основе полного термодинамического анализа, позволяющего определять равновесный состав системы по свойствам составляющих ее компонентов при заданных термодинамических параметрах.

рах. Для этого предлагается использовать метод термодинамического моделирования, основанный на принципе максимума энтропии, который заключается в том, что в равновесном состоянии энтропия изолированной системы максимальна. Тогда задача определения равновесного состава сложной гетерогенной многокомпонентной системы сводится к определению максимума энтропии как функции состава:

$$S(U, V, n) \Rightarrow \max,$$

где S – энтропия, Дж / (моль · К); U – полная внутренняя энергия, Дж / (моль · К); V – объём, м³; n – количество вещества, моль;

при следующих ограничениях:

- постоянство полной внутренней энергии системы;
- соблюдение условий материального баланса.

Задачу нахождения равновесного состава представим в виде решения системы нелинейных алгебраических уравнений с ограничениями, представленными выше. Подробное решение этой задачи рассматривалось ранее в статье [1] с использованием численных методов (рис. 1): 1) Лагранжа [2, 3] для перехода от задачи с ограничениями к задаче без ограничений; 2) Ньютона – Рафсона [4, 5], в котором на каждой итерации система нелинейных уравнений заменяется на систему линейных уравнений; 3) численного метода для решения системы линейных алгебраических уравнений.

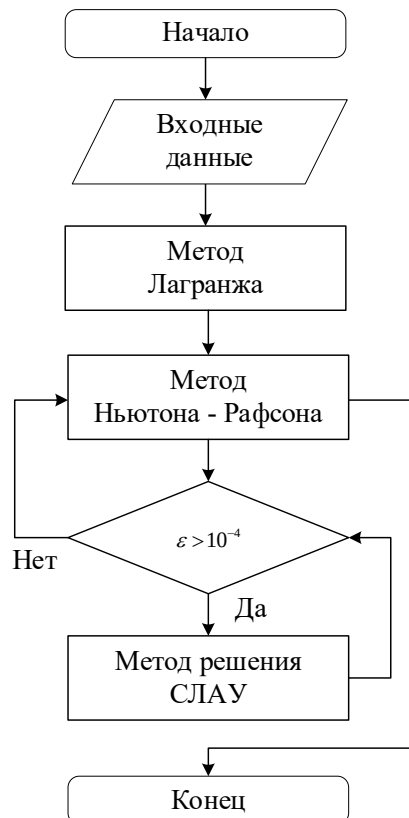


Рис. 1. Порядок работы численных методов в задаче нахождения равновесного состава сложной многокомпонентной системы

Проблемой является большое время вычисления равновесного состава сложной многокомпонентной системы при программной реализации принципа максимума энтропии. Наиболее трудоёмкой частью этой задачи является решение системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Для решения СЛАУ применяют как прямые, так и итерационные методы. СЛАУ, получаемая в ходе выполнения, не решается итерационными методами Гаусса – Зайделя и методом Якоби из-за требования к матрице быть положительно определенной. Задача нахождения равновесного состава решалась прямыми методами Гаусса [6] и LUP-разложения, при этом при количестве неизвестных более 150 скорость нахождения решения

при реализации метода LUP-разложения увеличилась в 3.6 – 4.4 раза [7]. Практические результаты авторов при решении СЛАУ показали, что методы подпространства Крылова (метод бисопряженных градиентов и квадратичный метод сопряженных градиентов) показывают наилучшие результаты по скорости нахождения решения для больших разреженных матриц [8, 9].

Сравним скорости расчета градиентными методами (квадратичный метод сопряженных градиентов и метод стабилизированных бисопряженных градиентов), показывающие быстрое время расчета для разреженных матриц [10], с методами Гаусса и LUP-разложения, применяемыми только для квадратичных матриц.

2. Методы решения систем линейных алгебраических уравнений

2.1. Квадратичный метод сопряженных градиентов (CGS – Conjugate Gradient Squared)

Алгоритм квадратичного метода сопряженных градиентов [11, 12] разработан на основе метода бисопряженных градиентов (BiCG) [13]. В алгоритме отсутствует умножение на транспонированную матрицу, поэтому алгоритм CGS работает быстрее, чем алгоритм BiCG [13].

Алгоритм квадратичного метода сопряженных градиентов имеет вид:

1. Задать начальное приближение x_0 (обычно $x_0 = 0$) и вычислить $r_0 = b - Ax_0$.

2. Выбрать вектор начальной невязки $\bar{r}$, удовлетворяющий условию $(r_0, \bar{r}) \neq 0$.

3. Цикл по переменной $i = 1, 2, \dots \text{Max_N}$ до сходимости метода.

4. $\rho_{i-1} = (\bar{r}, r_{i-1})$.

5. Если $\rho_{i-1} = 0$, система не решается.

6. Если $i = 1$,

$$u_1 = r_0$$

$$p_1 = u_1$$

7. Иначе

$$\beta_{i-1} = (\rho_{i-1} / \rho_{i-2})$$

$$u_i = r_i + \beta_{i-1} \cdot q_{i-1}$$

$$p_i = u_i + \beta_{i-1} (q_{i-1} + \beta_{i-1} p_{i-1})$$

8. Найти $\bar{p}$ из системы $M\bar{p} = p_i$:

$$\bar{v} = A\bar{p}$$

$$\alpha_i = \rho_{i-1} / (\bar{r}, \bar{v})$$

$$q_i = u_i - \alpha_i \bar{v}$$

9. Найти $\bar{u}$ из системы $M\bar{u} = u_i + q_i$:

$$x_i = x_{i-1} + \alpha_i \bar{u}$$

$$\bar{q} = A\bar{u}$$

$$r_i = r_{i-1} + \alpha_i \bar{q}$$

10. Если $\|r\|_2 / \|r_0\|_2 < \theta$, то x_i решение найдено, выход из цикла.

11. Увеличить i .

Конец цикла.

Для реализации рассмотренного метода используется предобуславливатель неполного LU-разложения. Данный предобуславливатель превосходит по точности и скорости сходимости методы с предобуславливателем Якоби [14].

Для квадратичного метода сопряженных градиентов алгоритмическая сложность определяется по формуле [10]:

$$f_{SGC}(N) = 10N^2 + 16N + 1 + N_{it}(20N^2 + 43N + 15) + (N_{it} - 1)(10N + 4), \quad (1)$$

где N – количество неизвестных, N_{it} – количество итераций.

2.2. Метод стабилизированных бисопряженных градиентов

Метод стабилизированных бисопряженных градиентов (BiCGStab) был предложен в 1992 г. Х. ван дер Ворстом [15]. Этот метод является улучшенной версией метода бисопряженных градиентов, разработанного Флетчером в 1975 году. Метод бисопряженных градиентов обладает неустойчивостью, итерационный процесс может оборваться без возможности его продления [16]. Для больших систем линейных алгебраических уравнений он показал свою эффективность в скорости решения [8]. В статье [8] скорость нахождения решения методом BiCGStab оказалась выше, чем у метода Зейделя и метода верхней релаксации примерно в 10 – 20 раз при размерности системы 809 элементов, а время расчета уменьшилось в 2.5 – 6 раз. Для повышения эффективности метода может применяться предобуславливание.

Решение СЛАУ в матричной форме состоит в нахождении неизвестных переменных:

$$Ax = b, \quad (2)$$

где $A = (a_{ij})$ – квадратная матрица коэффициентов, $b = (b_1, b_2, \dots, b_N)$ – вектор свободных членов, N – размерность матрицы.

Алгоритм сопряженного бистабиллизированного метода представим в следующем виде:

1. Задать начальные значения x_0 и вычислить $r_0 = b - Ax_0$.
2. Выбрать вектор начальной невязки, удовлетворяющий условию $(r_0, \bar{r}) \neq 0$.
3. Цикл по переменной $i = 1, 2 \dots \text{Max_N}$.
4. $\rho_{i-1} = (\bar{r}, r_{i-1})$.
5. Если $\rho_{i-1} = 0$, система не решается.
6. Если $i = 1$,
 $p_i = r_{i-1}$.
7. Иначе
 $\beta_{i-1} = (\rho_{i-1} / \rho_{i-2}) / (\alpha_{i-1} / \omega_{i-1})$
 $p_i = r_{i-1} + \beta_{i-1} (p_{i-1} - \omega_{i-1} v_{i-1})$.
8. Найти $\bar{p}$ из системы $M\bar{p} = p_i$:
 $v_i = A\bar{p}$
 $\alpha_i = \rho_{i-1} / (\bar{r}, v_i)$.
 $s = r_{i-1} - \alpha_i v_i$
9. Если $\|s\|_2 / \|r_0\|_2 < \theta$, то $x_i = x_{i-1} + \alpha_i \bar{p}$ решение найдено, выход из цикла.
10. Найти $\bar{s}$ из системы $M\bar{s} = s$:
 $t = A\bar{s}$
 $\omega_i = (t, s) / (t, t)$
 $x_i = x_{i-1} + \alpha_i \bar{p} + \omega_i \bar{s}$.
 $r_i = s - \omega_i t$

11. Если $\|s\|_2 / \|r_0\|_2 < \theta$, то x_i решение найдено, выход из цикла.

12. Увеличить i .

Конец цикла.

Алгоритмическая сложность BiCGStab [10] может быть вычислена по следующим формулам в зависимости от ветки алгоритма:

$$f_{BiCGStab}(N) = 5N^2 + 13N + 3 + N_{it}(10N^2 + 31N + 16) + (N_{it} - 1)(10N^2 + 33N + 11), \quad (3)$$

$$f_{BiCGStab}(N) = 5N^2 + 8N + 2 + N_{it}(20N^2 + 64N + 37). \quad (4)$$

Как видно из рис. 1, всегда будет применяться численный метод Лагранжа, затем на каждой итерации метода Ньютона – Рафсона будет вызываться численный метод для решения СЛАУ. Замеряться будет общее время расчета для нахождения равновесного состава.

3. Вычислительный эксперимент

Тестирование программы, реализующей численные методы, производилось на операционной системе Microsoft Windows 10 с использованием центрального процессора AMD Phenom 955 BE, 12 Gb DDR3 оперативной памяти. Вычисления производились с использованием одного ядра процессора. Программный код написан на языке C# в среде Visual Studio 2022.

3.1. Сравнение программных реализаций численных методов решения СЛАУ

В численном эксперименте сравнивалась работоспособность следующих методов: 1) прямого метода Гаусса; 2) разложения LUP; 3) квадратичного метода сопряженных градиентов и 4) метода бисопряженных градиентов (рис. 2).

Так как СЛАУ малой размерности решаются за несколько миллисекунд, а время выполнения одной и той же задачи может отличаться вплоть до двух десятков миллисекунд, измеряли серию вычислений для выбранного метода. В табл. 1 приведено сравнение быстродействия методов Гаусса, CGS, BiSGStab и LUP по общему времени измерения.

Таблица 1. Общее время нахождения решения в зависимости от метода при вычислении на одном ядре

Размерность матрицы	Шаг по температуре	Количество шагов	Общее время измерения, мс			
			Гаусса	CGS	BiSGStab	LUP
15	1	1001	4467	5299	4847	3852
79	50	21	7163	5358	5143	2943
153	100	11	24810	16846	16248	7151
174	100	11	33873	22491	21820	9079
214	100	11	73134	46063	45129	18160
355	200	6	194035	114241	108355	39795
376	200	6	220054	132257	128794	49222

В табл. 2 приведено сравнение быстродействия методов CGS, BiSGStab и LUP с методом Гаусса.

Таблица 2. Сравнение средних скоростей вычисления при использовании различных методов решения СЛАУ на одном ядре

Размерность матрицы	Ускорение метода по сравнению с методом Гаусса		
	$\tau_{\Gamma} / \tau_{\text{CGS}}$	$\tau_{\Gamma} / \tau_{\text{BiCGStab}}$	$\tau_{\Gamma} / \tau_{\text{LUP}}$
15	0.84	0.92	1.16
79	1.34	1.39	2.43
153	1.47	1.53	3.47
174	1.51	1.55	3.73
214	1.59	1.62	4.03
355	1.70	1.79	4.88
376	1.66	1.71	4.47

Стоит отметить, что матрица, подаваемая на вход при реализации метода решения СЛАУ, не является разреженной, поэтому решалась полная система линейных алгебраических уравнений. В работе [10] для решения разреженной матрицы получилось ускорение от 1.2 до 4.4 раза при использовании стабилизированного метода бисопряженных градиентов (BiCGStab) относительно метода Гаусса. Результаты вычислительных экспериментов приведены на рис. 2.

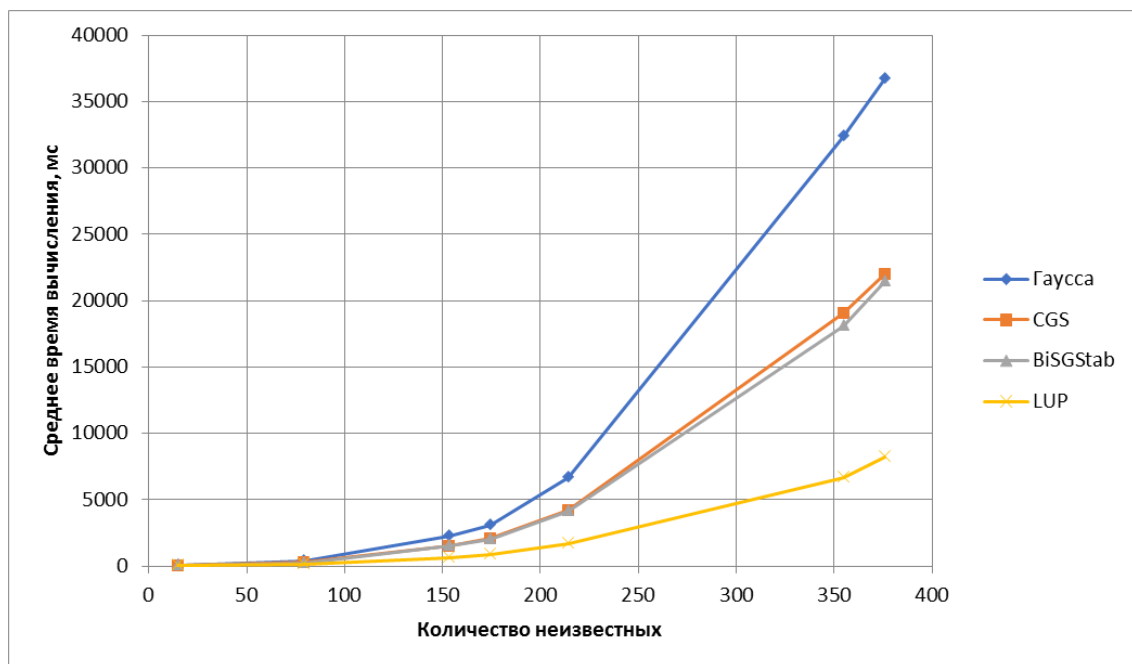


Рис. 2. Сравнение времени поиска решения методами Гаусса, CGS, BiCGStab, LUP

Как видно из табл. 1 и 2, самым быстрым является алгоритм метода LUP-разложения: он оказался быстрее остальных при размерности матрицы свыше 150 элементов в 3.60 – 4.55 раза. В методах CGS и BiCGStab наиболее трудоемкой задачей является реализация метода предобуславливания матрицы, в данном случае использовался метод ILU(0) – неполного разложения матрицы.

Так как за основу для алгоритмов CGS и BiCGStab были взяты алгоритмы, для которых алгоритмическая сложность вычисляется по формулам (1), (3) и (4), то сравним полученные результаты с теоретической сложностью этих алгоритмов, как показано в табл. 3.

Как видно из табл. 3, относительная ошибка между отношениями скоростей работы методов сопряженного градиента и стабилизированных бисопряженных градиентов не превышает 6.45 %.

Таблица 3. Сравнение теоретического и практического времени вычисления для методов CGS и BiCGStab

Размерность матрицы, N	Количество итераций N_{it}	Практическое ускорение	Теоретическое ускорение	Относительная ошибка, %
		$\tau_{CGS}/\tau_{BiCGStab}$	$\tau_{CGS}/\tau_{BiCGStab}$	
15	35	1.044	0.979	6.45
79	37	1.032	1.006	2.51
153	39	0.999	1.009	1.03
174	37	1.026	1.010	1.52
214	50	0.986	1.007	2.14
355	42	0.997	1.010	1.34
376	42	0.992	1.010	1.79

В табл. 4, как и в табл. 1, приведено сравнение скоростей нахождения равновесного состава с использованием методов Гаусса, CGS, BiSGStab и LUP. Результаты были получены при параллельном запуске 4 потоков, которые нагрузят все 4 ядра центрального процессора.

Таблица 4. Общее время нахождения решения для различных методов при параллельной реализации на 4 ядрах

Размерность матрицы	Шаг по температуре	Количество шагов	Общее время измерения, мс			
			Гаусса ₄	CGS ₄	BiSGStab ₄	LUP ₄
15	ΔT	m				
15	1	1001	1554	1793	1717	1287
79	50	21	2430	2374	2301	959
153	100	11	9083	6486	6495	2118
174	100	11	12170	8602	8387	2781
214	100	11	25096	17217	17462	5499
355	200	6	63319	40573	40705	13919
376	200	6	81648	49604	49986	17756

Увеличение средних скоростей вычисления методами CGS, BiCGStab и LUP относительно метода Гаусса при параллельной реализации алгоритма показано в табл. 5.

Таблица 5. Сравнение средних скоростей вычисления с использованием различных методов решения СЛАУ на 4 ядрах

Размерность матрицы	Ускорение метода по сравнению с методом Гаусса		
	$\tau_{G_4} / \tau_{CGS_4}$	$\tau_{G_4} / \tau_{BiCGStab_4}$	$\tau_{G_4} / \tau_{LUP_4}$
15	0.87	0.91	1.21
79	1.02	1.06	2.53
153	1.40	1.40	4.29
174	1.41	1.45	4.38
214	1.46	1.44	4.56
355	1.56	1.56	4.55
376	1.65	1.63	4.60

В табл. 6 приведены значения среднего увеличения скорости вычислений при использовании 4 ядер процессора по сравнению с использованием 1 ядра.

Таблица 6. Сравнение скорости вычисления при использовании 4 ядер и 1 ядра при реализации различных методов решения СЛАУ

Размерность матрицы	Отношение времен выполнения при вычислении в одном и четырех ядрах			
	$\tau_{\Gamma} / \tau_{\Gamma_4}$	$\tau_{\text{CGS}} / \tau_{\text{CGS}_4}$	$\tau_{\text{BiCSGStab}} / \tau_{\text{BiCSGStab}_4}$	$\tau_{\text{LUP}} / \tau_{\text{LUP}_4}$
15	2.87	2.96	2.82	2.99
79	2.95	2.26	2.24	3.07
153	2.73	2.60	2.50	3.38
174	2.78	2.61	2.60	3.26
214	2.91	2.68	2.58	3.30
355	3.06	2.82	2.66	2.86
376	2.70	2.67	2.58	2.77

Ранее в статье [17] было получено максимальное ускорение работы методов от 2.5 до 3.22 раза. Из табл. 5 видно, что ускорение при 4 ядрах составило от 2.24 до 3.38 раз. Самым быстрым оказался алгоритм метода LUP при использовании 4 ядер. При этом общее время расчета равновесного состава для шести разных температур методом LUP сократилось с 49.2 до 17.8 секунд.

3.2. Сравнение быстродействия алгоритмов численных методов решения СЛАУ с использованием динамически подключаемых библиотек линейной алгебры

Поскольку основной программный код был написан на языке C# в среде Visual Studio 2022, то рассмотрим динамически подключаемые библиотеки, находящиеся в свободном доступе: 1) Alglib (скачиваемый пакет alglibnet2 содержит один файл alglibnet2.dll) 257 тыс. скачиваний; 2) ILNumerics (пробная версия на 14 дней, для запуска требуется регистрация пробной лицензии, 5 файлов ILNumerics.Computing, ILNumerics.Core, ILNumerics.CorePlatforms, ILNumerics.Core.Runtime, ILNumerics.F2NET.LAPACK) 33 тыс. скачиваний; 3) MathNet.Numerics (название скачиваемой библиотеки MathNet.Numerics.dll для основной работы, а также для использования ускорения от Intel MKL – две дополнительные библиотеки: libMathNetNumericsMKL.dll и libiomp5md.dll) 29.3 млн. скачиваний; 4) Accord.Math (скачиваются три библиотеки Accord.dll, Accord.Math.Core.dll и Accord.Math.dll) 5.16 млн. скачиваний.

В библиотеке Alglib поддержка ускорения от Intel MKL присутствует, но дополнительные файлы, к сожалению, не были отправлены после запроса о регистрации. В динамически подключаемых библиотеках Alglib и Accord все реализованные методы вызываются вручную, а в библиотеках ILNumerics и MathNet используется один вызов метода для решения СЛАУ, который в автоматическом режиме выбирает подходящую реализацию в зависимости от типа входной матрицы.

В задаче нахождения равновесного состава термодинамической системы исходная матрица для решения СЛАУ является симметричной, но не положительно определенной. Поэтому разложение Холецкого в динамически подключаемых библиотеках ALGLIB, ILNumerics и Accord не выполняется. В табл. 7 приведем сравнение быстродействия методов при параллельной реализации на 4 ядрах, реализованных в пакете Alglib. При этом сравнивалось, как и в разделе 3.1, общее время решения задачи, а не время решения СЛАУ. В данной библиотеке есть реализация задания матриц с вещественными числами (r) и комплексными числами (c).

Таблица 7. Общее время работы программы в зависимости от метода в библиотеке ALGLIB при параллельной реализации на 4 ядрах

Размерность матрицы	Шаг по температуре	Количество шагов	Общее время измерения, мс					
			rГаусса ₄	cГаусса ₄	rLU ₄	cLU ₄	rmix ₄	cmix ₄
15	1	1001	6798	6299	2462	5393	3310	7065
79	50	21	10369	3969	1560	3777	1588	3941
153	100	11	34202	8802	2426	7770	2795	9479
174	100	11	54384	11433	3129	10339	3581	13099
214	100	11	98447	22515	6022	20181	6846	26052
355	200	6	245372	55261	13802	51059	15951	59590
376	200	6			17321			

Из табл. 7 видно, что самым быстрым оказался алгоритм метода LU с вещественными числами, который по скорости вычисления близок к методу LUP (табл. 4), реализованному авторами.

В табл. 8 приведены результаты скорости нахождения решения с использованием динамически подключаемых библиотек ILNumerics, MathNet и Accord. В первых двух библиотеках алгоритмы для решения задачи выбирались автоматически, а в библиотеке Accord использовался метод LU-разложения.

Таблица 8. Общее время выполнения программы в зависимости от метода в библиотеках ILNumerics, MathNet и Accord при параллельной реализации на 4 ядрах

Размерность матрицы	Шаг по температуре	Количество шагов	Общее время измерения, мс			
			ILNumerics ₄	MathNet ₄	Accord ₄	MathNet ₄ + MKL
15	1	1001	28030	1265	1104	1056
79	50	21	2689	1077	492	480
53	100	11	2619	1207	996	895
174	100	11	3461	1301	1219	1030
214	100	11	5754	2418	2106	1578
355	200	6	12370	5230	4238	2562
376	200	6	17803	5958	5186	2977

Как видно из табл. 8 самыми быстрыми оказались алгоритмы методов, реализованных в библиотеке MathNet с поддержкой MKL (для поддержки требуются файлы библиотек 155 Мб и 95.5 Мб для 64-битной и 32-битной версий программы соответственно). Реализация авторов сравнима по скорости выполнения с библиотекой ILNumerics и проигрывает по скорости вычисления с использованием библиотеки MathNet + MKL при решении задачи для более 150 элементов от 2.6 до 6 раз. При возрастании размерности матриц отрыв в скорости вычисления с использованием библиотек MathNet + MKL будет увеличиваться.

4. Заключение

Программно реализованные авторами градиентные методы CGS и BiCGStab показали близкие по скорости вычислений результаты с небольшим преимуществом метода стабилизированного бисопряженного градиента. Ускорение работы градиентных методов по сравнению с методом Гаусса составило 1.42 – 1.71 при размерности матрицы свыше 150 элементов. Программа с использованием метода LUP показала лучшие результаты: ускорение относительно метода Гаусса составило 4.29 – 4.6 раза. Параллельная реализация алгоритмов на 4-ядерном процессоре дала ускорение в вычислении от 2.24 до 3.38 раз для всех методов.

Сравнение скорости расчетов при использовании динамически подключаемых библиотек линейной алгебры, находящихся в открытом доступе, показало, что самый быстрый – реализованный авторами алгоритм метода LUP.

Литература

1. Сеченов П. А., Рыбенко И. А. Численный метод и математическая модель нахождения равновесного состава термодинамической системы программного комплекса T-Energy // Вестник Дагестанского государственного технического университета. Технические науки. 2022. Т. 49, № 4. С. 104–112.
2. Базилевский М. П., Власенко Л. Н. Оценивание моделей парной линейной регрессии с параметрами в виде матриц линейных операторов двумерного векторного пространства // Моделирование, оптимизация и информационные технологии. 2020. Т. 8, № 1 (28).
3. Андрианов И. К. Численная модель многокритериальной оптимизации тепловой защиты оболочечных элементов в условиях теплового и силового нагружения // Ученые записки Комсомольского-на-Амуре государственного технического университета. 2021. Т. 51, № 3. С. 14–20.
4. Покаместов Д. А., Кологривов В. А., Бабур-Карателли Г. П., Крюков Я. В. Расчёт зон обслуживания кластера базовых станций систем сотовой связи при заданном распределении абонентов // Вестник СибГУТИ. 2017. Т. 38, № 2. С. 26–34.
5. Журтов А. В., Хежев Т. А., Хаджишалапов Г. Н., Карданов А. А., Шогенцуков М. А. Напряженно-деформированное состояние двухслойных армоцементных оболочек в условиях пожара // Вестник Дагестанского государственного технического университета. Технические науки. 2022. Т. 49, № 1. С. 112–121.
6. Белов В. М., Зырянова Е. В., Рябова Е. В. Интервально-статистический метод определения параметров функций принадлежности в задачах оценки качества систем комплексной безопасности // Вестник СибГУТИ. 2016. Т. 34, № 2. С. 85–96.
7. Сеченов П. А. Сравнение быстродействия численных методов Гаусса и LUP-разложения в задаче нахождения равновесного химического состава // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2023. Т. 19, № 2. С. 79–85.
8. Пузикова В. В. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом BiCG-STAB с предобуславливанием // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Серия Естественные науки. 2011. № S1. С. 124–133.
9. Чадов С. Н. О решении разреженных систем линейных уравнений при помощи стабилизированного метода бисопряженных градиентов // Вестник Ивановского государственного энергетического университета. 2007. № 3. С. 86–88.
10. Ахунов Р. Р. Алгоритмы и комплекс программ для итерационного решения систем линейных алгебраических уравнений при анализе полосковых структур методом моментов: дис. ... канд. тех. наук. Томск. 2018. 199 с.
11. Серышева И. А., Хрусталева Ю. П. Формализованная методика обработки измерительной информации, получаемой в процессе функционирования группового эталона времени и

- частоты // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2018. Т. 12, № 4. С. 163–172.
12. Сорокиков П. С., Горнов А. Ю. Пакет программ теорт для решения невыпуклых задач параметрической идентификации // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2022. Т. 26, № 2. С. 53–60.
 13. Горбаченко В. И. Вычислительная линейная алгебра с примерами на MATLAB. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 320 с.
 14. Гоголева С. Ю. Предобусловливание на основе LU-разложения в итерационных методах для решения систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами // Материалы IV Международной конференция и молодежной школы «Информационные технологии и нанотехнологии», Самара, 24–27 апреля, 2018. С. 1493–1498.
 15. Vander Vorst H. A. Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for solution of non-symmetric linear systems // SIAM J. Sci. Stat. Comp. 1992. № 2. P. 631–644.
 16. Куксенко С. П., Газизов Т. Р. Итерационные методы решения системы линейных алгебраических уравнений с плотной матрицей. Томск: Томский государственный университет, 2007. 208 с.
 17. Сеченов П. А., Кожемяченко В. И., Рыбенко И. А. Параллельная реализация алгоритма расчёта равновесного состава в программном комплексе T-Energy // Вестник Поволжского государственного технологического университета. Серия: Радиотехнические и информационные системы. 2023. Т. 57, № 1. С. 64–73.

Сеченов Павел Александрович

к.т.н., доцент кафедры прикладных информационных технологий и программирования, Сибирский государственный индустриальный университет (СибГИУ, 654007, Новокузнецк, ул. Кирова, зд. 42), тел. +7 3843 701 563, e-mail: pavesa89@mail.ru, ORCID ID: 0000-0003-4551-3822.

Рыбенко Инна Анатольевна

д.т.н., заведующий кафедрой прикладных информационных технологий и программирования, Сибирский государственный индустриальный университет (СибГИУ, 654007, Новокузнецк, ул. Кирова, зд. 42), тел. +7 3843 701 563, e-mail: rybenkoi@mail.ru, ORCID ID: 0000-0003-1679-0839.

Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад соавторов: Каждый автор внес равную долю участия как во все этапы проводимого теоретического исследования, так и при написании разделов данной статьи.

Comparison of Software Implementations of SLAE Solution Methods in the Problem of Finding the Equilibrium Composition of a Complex Multicomponent Heterogeneous System

Pavel A. Sechenov, Inna A. Rybenko

Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

Abstract: The article presents a comparative analysis of the software implementation performance of numerical methods in solving the problem of finding the equilibrium composition of a complex multicomponent heterogeneous system. The task of finding the equilibrium composition of the system is divided into the following subtasks: 1) taking into account constraints (Lagrange method); 2) finding the maximum function of a nonlinear function: 2.1) converting a function into a system of linear equations (Newton Raphson method); 2.2) using numerical methods to solve a system of linear algebraic equations. An analytical review of the literature data has shown that gradient methods have better performance when solving systems of linear algebraic equations. Therefore, the article compared the performance of the software implementation of the entire algorithm using direct (Gauss, LUP decomposition) and iterative methods (conjugate gradient method, biconjugate gradient stabilized method) for solving a system of linear algebraic equations. The calculation speed of the developed program was also compared using dynamically connected libraries Alglib, ILNumerics, MathNet, Accord to solve the SLAE in the problem of finding the equilibrium composition of a thermodynamic system.

Keywords: numerical methods, conjugate gradient method, method of stabilized bisjoint gradients, speed, equilibrium composition, dynamic link library.

For citation: Sechenov P. A., Rybenko I. A. Comparison of software implementations of SLAE solution methods in the problem of finding the equilibrium composition of a complex multicomponent heterogeneous system (in Russian). *Vestnik SibGUTI*, 2024, vol. 18, no. 3, pp. 86-98. <https://doi.org/10.55648/1998-6920-2024-18-3-86-98>.



Content is available under the license
Creative Commons Attribution 4.0
License

© Sechenov P. A., Rybenko I. A., 2024

The article was submitted: 11.01.2024;
revised version: 25.02.2024;
accepted for publication 02.04.2024.

References

1. Sechenov P. A., Rybenko I. A. CHislennyj metod i matematicheskaya model' nahozhdeniya ravnovesnogo sostava termodinamicheskoy sistemy programmno kompleksa T-Energy [Numerical method and mathematical model for finding the equilibrium composition of the thermodynamic system of the T-Energy software package]. *Herald of Dagestan State Technical University. Technical Sciences*, 2022, vol. 49, no. 4, pp. 104-112.
2. Bazilevskij M. P., Vlasenko L. N. Ocenivanie modelej parnoj linejnoy regressii s parametrami v vide matric linejnyh operatorov dvumernogo vektornogo prostranstva [Estimation of pair linear regression models with parameters in the form of linear operator matrices of two-dimensional vector space]. *Modeling, Optimization and Information Technology*, 2020, vol. 8, no 1 (28).
3. Andrianov I. K. CHislennaya model' mnogokriterial'noj optimizacii teplovoj zashchity obolocheknyh elementov v usloviyah teplovogo i silovogo nagruzheniya [Numerical multi-criteria optimization model of the shell thermal protection under conditions of thermal and force loading]. *Scholarly Notes of KNASTU*, 2021, vol. 51, no. 3, pp. 14-20.
4. Pokamestov D. A., Kologrivov V. A., Babur-Karatelli G. P., Kryukov YA. V. Raschyot zon obsluzhivaniya klastera bazovyh stancij sistem sotovoj svyazi pri zadannom raspredelenii abonentov [Calculation of base station coverage cluster for a given subscriber distribution]. *Vestnik SibGUTI*, 2017, no. 2, pp. 26-34.
5. Zhurtov A. V., Khezhev T. A., Khadzhishalapov G. N., Kardanov A. A., Shogentsukov M. A. Napryazhenno-deformirovannoe sostoyanie dvuhslojnyh armocementnyh obolochek v usloviyah pozhara [Stress strain state of double-layered ferrocement shells under the fire condition]. *Herald of Dagestan State Technical University. Technical Sciences*, 2022, no. 49(1), pp. 112-121.

6. Belov V. M., Zyrjanova E. V., Rjabova E. V. Interval'no-statisticheskij metod opredeleniya parametrov funktsij prinadlezhnosti v zadachah ocenki kachestva sistem kompleksnoj bezopasnosti [Interval-statistical method of membership functions parameters determination in problems of the integrated security system quality assessment]. *Vestnik SibGUTI*. 2016, no. 2, pp. 85-96.
7. Sechenov P. A. Sravnenie bystrodejstviya chislennykh metodov Gaussa i LUP-razlozheniya v zadache nahozhdeniya ravnovesnogo himicheskogo sostava [Comparison of the speed of numerical methods of Gauss and LUP decomposition in the problem of finding the equilibrium chemical composition]. *The Bulletin of Voronezh state technical university*, 2023, vol. 19. no. 2, pp. 79-85.
8. Puzikova V. V. Reshenie sistem linejnykh algebraicheskikh uravnenij metodom BiCGSTAB s pre-dobuslovlivaniem [Solution of systems of linear algebraic equations by BiCGStab method with preconditioning]. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Natural Sciences Series*, 2011, no. S1, pp. 124-133.
9. CHadov S. N. O reshenii razrezhennykh sistem linejnykh uravnenij pri pomoshchi stabilizirovannogo metoda bisopryazhennykh gradientov [On the solution of sparse systems of linear equations using the stabilized method of bisjoint gradients]. *Vestnik of the Ivanovo State Power Engineering University*, 2007, no. 3, pp. 86-88.
10. Ahunov R. R. *Algoritmy i kompleks programm dlya iteracionnogo resheniya sistem linejnykh algebraicheskikh uravnenij pri analize poloskovykh struktur metodom momentov* [Algorithms and software package for iterative solution of systems of linear algebraic equations in the analysis of strip structures by the method of moments]. Ph.D. thesis, Tomsk. 2018, 199 p.
11. Serysheva I. A., Hrustalev YU. P. Formalizovannaya metodika obrabotki izmeritel'noj informacii, poluchaemoj v processe funkcionirovaniya gruppovogo etalona vremeni i chastoty [The formalized technique of processing measuring information obtained during the operation of a group standard of time and frequency]. *Information and mathematical technologies in science and management*, 2018, no. 4 (12), pp. 163-172.
12. Sorokovikov P. S., Gornov A. YU. Paket programm meopt dlya resheniya nevypuklykh zadach parametricheskoy identifikacii [MEOPT software package for solving non-convex problems of parametric identification]. *Information and mathematical technologies in science and management*, 2022, no. 2 (26). pp. 53-60.
13. Gorbachenko V. I. *Vychislitel'naya linejnaya algebra s primerami na MATLAB* [Computational linear algebra with MATLAB examples Saint Petersburg, BHV-Peterburg, 2011, 320 p.
14. Gogoleva S. YU. Predobuslovlivanie na osnove LU-razlozheniya v iteracionnykh metodah dlya resheniya sistem linejnykh algebraicheskikh uravnenij s razrezhennymi matricami [LU-based preconditioning in iterative methods for solving systems of linear algebraic equations with sparse matrices] *IV Mezhdunarodnaya konferenciya i molodyozhnaya shkola "Informacionnye tekhnologii i nanotekhnologii"*, Samara, 2018, pp. 1493-1498.
15. Vander Vorst H. A. Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for solution of non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comp*, 1992, no. 2. pp. 631-644.
16. Kuksenko S. P., Gazizov T. R. *Iteracionnye metody resheniya sistemy linejnykh algebraicheskikh uravnenij s plotnoj matricej* [Iterative methods for solving a system of linear algebraic equations with a dense matrix]. Tomsk: Tomskij gosudarstvennyj universitet, 2007, 208 p.
17. Sechenov P. A., Kozhemyachenko V. I., Rybenko I. A. Parallel'naya realizaciya algoritma raschyota ravnovesnogo sostava v programmnom komplekse T-Energy [Parallel Implementation of the Equilibrium Composition Calculation Algorithm in the T-Energy Software Package]. *Vestnik of Volga State University of Technology. Ser.: Radio Engineering and Infocommunication Systems*, 2023, vol. 57, no. 1, pp. 64-73.

Pavel A. Sechenov

Ph.D. (Tech.), associate professor at the Department of Applied Information Technologies and Programming, Siberian State Industrial University (SibSIU, Russia, 654007, Novokuznetsk, Kirov St. 42), e-mail: pavesa89@mail.ru, ORCID: 0000-0003-4551-3822.

Inna A. Rybenko

D. Sc. (Tech.), Assoc. Head of the Department of Applied Information Technologies and Programming, Siberian State Industrial University (SibSIU, Russia, 654007, Novokuznetsk, Kirov St. 42), e-mail: rybenkoi@mail.ru, ORCID ID: 0000-0003-1679-0839.