

В. П. Ильин

ДВУХУРОВНЕВЫЕ МЕТОДЫ НАИМЕНЬШИХ
КВАДРАТОВ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

§1. ВВЕДЕНИЕ

Рассматривается классическая задача вычислительной алгебры о решении системы алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$Au = f, \quad A = \{a_{k,l}\} \in \mathcal{R}^{N,N}; \quad u, f \in \mathcal{R}^N, \quad (1)$$

в которой матрица A и вектор правой части заданы. Предполагается, что порядок N системы очень большой, а матрица A является разреженной и плохо обусловленной, вследствие чего реализация численного решения СЛАУ (1) осуществляется с помощью параллельных предобусловленных итерационных методов в подпространствах Крылова на многопроцессорных вычислительных системах (МВС). При несимметричности матрицы A оптимальные по порядку скорости сходимости итерационные процессы (например, методы полусопряженных невязок SCR или обобщенных минимальных невязок GMRES [1,2]) используют “длинные” векторные рекурсии, которые в практических расчетах неизбежно укорачиваются с помощью процедур рестарта, проводимых периодически через заданное количество m итераций (в этом случае, очередной вектор невязки определяется из исходного уравнения и рекуррентные крэловские вычисления “стартуют” заново). Это приводит к значительному замедлению процесса, что является вынужденной платой за ресурсные ограничения компьютера. Другой путь к экономии ресурсов заключается во введении ограниченной ортогональности направляющих векторов. Возможно также и комбинирование этих двух подходов.

Целью данной работы является исследование ускорения скорости сходимости рестартовых итерационных процессов путем использования метода наименьших квадратов (LSM – от Least Squares Method)

Ключевые слова: разреженные матрицы, подпространства Крэлова, двухуровневые методы наименьших квадратов, методы сопряженных невязок и чебышевского ускорения, численные эксперименты.

Работа поддержана грантами РНФ № 14-11-00485П и РФФИ № 16-29-1522/17 офи-м.

для уменьшения евклидовой нормы невязки. Предлагаемый подход описывается в применении к мультипредуобусловленным методам полусопряженных невязок MP-SCR (Multi-Preconditioned Semi-Conjugate Residual, [3]), которые в частных случаях эквивалентны по скорости сходимости широко применяемому “гибкому” методу обобщенных минимальных невязок (FGMRES, Flexible Generalized Minimal Residual [1]). Кроме этого, исследуется применение вместо SCR более экономичных алгоритмов сопряженных невязок CR и чебышевского ускорения, см. [2]. Поскольку они в общем случае для несимметричных СЛАУ не обладают вариационными свойствами, а в определенных ситуациях могут даже расходиться, то минимизация невязки в момент рестарта для текущего периода осуществляется с помощью LSM. Более того, проводится еще второй уровень оптимизации, заключающийся в использовании линейной комбинации самих рестартовых приближений с помощью наименьших квадратов.

Настоящая работа построена следующим образом. В §2 описываются предложенные двухуровневые методы ускорения итерационных процессов в подпространствах Крылова. Следующий параграф посвящен изложению результатов экспериментального исследования рассматриваемых алгоритмов. В заключении обсуждаются перспективы распараллеливания рассматриваемых подходов и их применения для решения практических задач.

§2. ДВУХУРОВНЕВЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

Рассмотрим мультипредуобусловленный итерационный метод полусопряженных невязок при заданном начальном приближении u^0 , описываемый следующими формулами:

$$\begin{aligned} r^0 &= f - Au^0, \quad p_l^0 = (B_0^{(l)})^{-1}r^0, \quad l = 1, \dots, M_0, \\ P_0 &= [p_1^0 \cdots p_{M_0}^0] \in \mathcal{R}^{N, M_0}; \\ n &= 0, 1, \dots : \quad u^{n+1} = u^n + P_n \bar{\alpha}_n = u^0 + P_0 \bar{\alpha}_0 + \cdots + P_n \bar{\alpha}_n, \quad (2) \\ r^{n+1} &= r^n - AP_n \bar{\alpha}_n = r^0 - AP_0 \bar{\alpha}_0 - \cdots - AP_n \bar{\alpha}_n, \\ \bar{\alpha}_n &= (\alpha_n^1, \dots, \alpha_n^{M_n})^T, \quad P_n = [p_1^n \cdots p_{M_n}^n] \in \mathcal{R}^{N, M_n}. \end{aligned}$$

Здесь $p_l^0 = (B_0^{(l)-1})r^n$, $l = 1, \dots, M_n$, суть направляющие векторы, определяемые по начальному вектору невязки r^0 с помощью каких-либо предобуславливающих невырожденных матриц $B_0^{(l)}$, $\bar{\alpha}_n \in \mathcal{R}^{M_n}$ – векторы итерационных параметров, а M_n – количество “предобуславливателей” на n -й итерации. Из рассмотрения нормы $\|r^{n+1}\|^2 = (r^{n+1}, r^{n+1})$ следует, что она достигает своего минимума в блочном подпространстве Крылова

$$K_{\bar{M}_n} = \text{Span}\{P_0, \dots, A^{n-1}P_{n-1}\}, \quad \bar{M}_n = \sum_{k=0}^{n-1} M_k, \quad (3)$$

если выполняются условия ортогональности

$$\begin{aligned} P_n^T A^T A P_k &= D_{n,k} = 0 \text{ для } k \neq n, \\ D_{n,n} &= \text{diag}\{\rho_{n,l} = (p_n^l)^T A^T A p_n^l\} \in \mathcal{R}^{M_n, M_n}, \end{aligned} \quad (4)$$

а соответствующие коэффициенты определяются формулами

$$\bar{\alpha}_n = \{\alpha_{n,l}\} = D_{n,n}^{-1} P_n^T A^T r^0. \quad (5)$$

При этом справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \|r^{n+1}\|^2 &= (r^n, r^n) - (C_n r^0, r^0) \\ &= (r^0, r^0) - (C_0 r^0, r^0) - \dots - (C_n r^0, r^0), \\ C_n &= P_n A D_{n,n}^{-1} A^T P_n^T. \end{aligned} \quad (6)$$

Непосредственная проверка соотношений ортогональности (4) показывает, что для их выполнения достаточно определить “направляющие матрицы” P_{n+1} из рекурсий

$$\begin{aligned} P_{n+1} &= Q_{n+1} - \sum_{k=0}^n P_k \bar{\beta}_{k,n} Q_{n+1} [q_1^{n+1} \dots q_{m_s}^{n+1}] \in \mathcal{R}^{N, m_s}, \\ q_l^{n+1} &= (B_{n+1}^{(l)})^{-1} r^{n+1}, \quad l = 1, \dots, M_n, \quad \bar{\beta}_{k,n} = D_{k,k}^{-1} P_k^T A^T A Q_{n+1}. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь $\bar{\beta}_{k,n} = (\beta_n^1, \dots, \beta_n^{M_k})^T \in \mathcal{R}^{M_k}$ – векторные коэффициенты, а $B_{n+1}^{(l)}$ – выбираемые каким-либо образом легко обратимые невырожденные предобуславливающие матрицы, количество M_n которых на каждой n -й итерации может быть различным. Конкретная реализация формул (7) может быть осуществлена с помощью устойчивой модифицированной ортогонализации Грама–Шмидта [4].

Теорема 1. Пусть матрицы A и $B_n^{(l)}$, $n = 0, 1, \dots$; $l = 1, \dots, M_n$, являются невырожденными, а матрицы P_n имеют полный ранг. Тогда итерационный процесс (2)–(7) обеспечивает минимизацию $\|r^{n+1}\|$ в блочном подпространстве Крылова (3) с полной размерностью \bar{M}_n . При этом выполняются условия полуортогональности векторов невязки

$$(A(B_n^{(l)})^{-1}r^n, r^k) = \begin{cases} 0, & k < n, \\ \sigma_n = (A(B_n^{(l)})^{-1}r^n, r^n), & k = n, \end{cases}$$

а коэффициенты рекуррентных соотношений могут быть вычислены по формуле $\alpha_{n,l} = \sigma_n / \rho_{n,l}$.

Рассмотренный вариант метода MP-SCR является обобщением FGMRES в том плане, что на разных итерациях предобусловливаватели могут отличаться не только своим видом, но и их количеством. Особенностью данных алгоритмов является необходимость в процессе выполнения итераций хранить \bar{M}_{n+1} векторов, что при больших n требует слишком больших вычислительных ресурсов. Во избежание этого используются процедуры периодического применения рестартов через каждые m_r итераций, а также проведение ограниченной ортогонализации, когда в соотношениях (7) суммирование проводится только для $k = n, n-1, \dots, \max\{0, n-m_0+1\}$, т.е. при $n > m_0$ хранятся последние m_0 направляющих матриц. Под рестартом понимается итерационная процедура, в которой очередной вектор невязки r^{n+1} вычисляется не из рекуррентного соотношения (2), а из исходного уравнения, как начальный вектор r^0 . Последующие m_r итерационных приближений опять определяются из рекурсий, затем опять осуществляется рестарт, и т.д.

Данный итерационный процесс можно обобщить тем образом, что на каждом s -м рестарте длина периода, которую обозначим $m_r^{(s)}$, меняется, то есть $m_r^{(s)} = n_s - n_{s-1}$, где $n_0 = 0$, а n_s есть номер итерации, на которой выполняется s -й рестарт. Кроме того, количество ортогонализуемых матриц P_n , обозначаемое далее через $m_0^{(n)}$, может меняться не только на разных рестартовых периодах, но и на каждой итерации. В получаемом редуцированном методе R-SCR рекуррентные соотношения (2) записываются по периодам рестартов обычным

образом, но только при этом во время рестартов соответствующая невязка вычисляется из исходного уравнения. Первое равенство из формулы (7) в данном случае приводится к виду

$$P_{n+1} = Q_{n+1} - \sum_{k=\bar{m}_0^{(n)}}^n P_k \bar{\beta}_{k,n}, \quad n = n_s, n_s + 1, \dots, n_{s+1} - 1, \quad (8)$$

$\bar{m}_0^{(n)} = \min\{0, n - m_0^{(n)}\}$, $s = 1, 2, \dots$. В методе R-SCR, описываемом формулами (2) (но только для $n = n_s, n_s + 1, \dots, n^{s+1} - 1$; $s = 1, 2, \dots$) и соотношениями (8), размерности подпространств Крылова очевидным образом понижаются, что приводит к уменьшению скорости сходимости итерационного процесса. Для устранения или, по крайней мере, ослабления данного недостатка применим дополнительное ускорение рассматриваемого редуцированного алгоритма путем использования линейных комбинаций векторов, вычисляемых на рестартовых итерациях и оптимизируемых по условию минимальности невязок. Предлагаемый ускоренный редуцированный метод AR-SCR является двухуровневым итерационным процессом в подпространствах Крылова и наглядно представляется с помощью вспомогательных векторов

$$v^s = u^{n_s} - u^{n_{s-1}}, \quad w^s = Av^s = r^{n_{s-1}} - r^{n_s}, \quad s = 1, \dots, M_s, \quad (9)$$

где M_s означает количество проведенных рестартов. Будем искать уточненные значения рестартовых приближений u^{n_s} в виде

$$\begin{aligned} \hat{u}^{n_s} &= u^{n_s} + c_1 v^1 + \dots + c_s v^s = u^{n_s} + V_s \bar{c}_s, \\ V_s &= (v^1 \dots v^s) \in \mathcal{R}^{N,s}, \quad \bar{c}_s = (c_1, \dots, c_s)^T \in \mathcal{R}^s. \end{aligned} \quad (10)$$

Соответствующие векторы невязок записываются в форме

$$\begin{aligned} \hat{r}^{n_s} &= f - A\hat{u}^{n_s} = r^{n_s} - W_s \bar{c}_s, \\ W_s &= (w^1 \dots w^s) \in \mathcal{R}^{N,s}, \quad s = 1, \dots, M_s. \end{aligned} \quad (11)$$

Для определения неизвестных векторов коэффициентов из (11) следует переопределенная СЛАУ

$$W_s \bar{c}_s = r^{n_s}, \quad s = 1, \dots, M_s, \quad (12)$$

характеризующая в определенном смысле “малость” невязки \hat{r}^{n_s} и в общем случае не имеющая классического решения. Для нахождения \bar{c}_s можно использовать обобщенную обратную матрицу W_s^+ , а также применить к уравнению левую трансформацию Гаусса, в результате

чего получаем обобщенное решение по методу наименьших квадратов LSM [5]:

$$B_s \bar{c}_s = W_s^T r^{n_s}, \quad B_s = W_s^T W_s \in \mathcal{R}^{s,s}, \quad (13)$$

обеспечивающее минимизацию вектора невязки

$$\hat{r}^{n_s} = \min_{c_1, \dots, c_s} \{f - A\hat{u}^{n_s}\} \quad (14)$$

в подпространстве Крылова $\mathcal{K}_{M_s}(r^0, A)$, размерность которого равна $M_s = M_s + \min\{m_0^{(n)}\}$. Отметим, что система уравнений (13) с симметричной положительно полуопределенной матрицей B_s всегда совместна, но она невырождена, только если прямоугольная матрица W_s имеет полный ранг s . Численные решения систем (12) и (13) с помощью, например, метода сингулярного разложения SVD [4] в случае точных вычислений будут одинаковыми. Однако при учете машинных округлений следует иметь в виду, что СЛАУ (13) на порядок хуже обусловлена, чем (12).

Замечание 1. Нормы векторов невязок \hat{r}^{n_s} достигают своих минимумов в мультипредобусловленных блочных подпространствах Крылова с достаточно сложной структурой, размерности которых формально определяются количеством параметров.

Дадим теперь несколько комментариев относительно возможных обобщений или, наоборот, частных случаев предлагаемого подхода. Во-первых, вместо используемых методов MP-SCR итерации между рестартами можно проводить с помощью алгоритма полусопряженных невязок SCR [2], а также методами полной ортогонализации и обобщенных минимальных невязок (FOM и GMRES, [1]) на основе ортогонализации Арнольди, которые являются асимптотически эквивалентными по порядку скорости сходимости итераций. Во-вторых, в рекуррентных формулах (8) вместо суммы можно брать только один член со скалярным множителем $\beta_n = \beta_{n,n}$, определяемым в (7). Данную ситуацию можно представить как частный случай формулы (8), если в ней положить $\bar{m}_0^{(n)} = n$:

$$\begin{aligned} s &= 0, 1, \dots, \quad r^{n_s} = f - Au^{n_s}, \quad P_l^{n_s} = (B_{n_s}^{(l)})^{-1} r^{n_s}, \\ n &= n_s, n_s + 1, \dots, n_{s+1} - 1 : \quad u^{n+1} = u^n - P_n \bar{\alpha}_n, \\ P_{n+1} &= Q_{n+1} - P_n \bar{\beta}_n, \quad r^{n+1} = r^n - Ap_n \bar{\alpha}_n, \\ P_n &= [p_1^n \dots p_{M_n}^n] \in \mathcal{R}^{N, M_n}, \quad \bar{\alpha}_n = (\alpha_n^1, \dots, \alpha_n^{M_n})^T. \end{aligned} \quad (15)$$

Формально при этом между рестартами мы получаем мультипредобусловленный метод сопряженных невязок MP-CR с короткими рекурсиями, который для несимметричных СЛАУ обеспечивает только локальную минимизацию невязки в одномерных пространствах Крылова. Однако его можно рассматривать как способ построения некоторых вспомогательных векторов, определяемых аналогично (9), но только на итерациях между рестартами:

$$\tilde{v}^n = u^n - u^{n-1}, \quad \tilde{w}^n = A\tilde{v}^n, \quad n = n_s + 1, n_s + 2, \dots, n_s + 1 = n_s + m_r^{(s)}. \quad (16)$$

С помощью LSM по этим векторам можно минимизировать векторы невязок на рестартовых итерациях, последовательно используя для $s = 0, 1, \dots$ аналогичные (10)–(14) формулы:

$$\begin{aligned} \tilde{u}^{n_s+1} &= u^{n_s+1} + \tilde{V}_s \tilde{c}_s, \\ \tilde{V}_s &= (v^{n_s} + 1, v^{n_s} + 2, \dots, v^{n_s+1}) \in \mathcal{R}^{N, m_r^{(s)}}, \quad \tilde{c}_s \in \mathcal{R}^{m_r^{(s)}}, \\ \tilde{r}^{n_s+1} &= r^{n_s+1} - \tilde{W}_s \tilde{c}_s, \quad \tilde{W}_s = AV_s, \\ \tilde{W}_s \tilde{c}_s &= r^{n_s+1}, \quad \tilde{B}_s \tilde{c}_s = \tilde{W}_s^T W_s^T \tilde{c}_s = W_s^T r^{n_s+1}. \end{aligned} \quad (17)$$

Дальнейшие межрестартовые итерации при этом реализуются с учетом данных уточнений, т.е. в рекуррентных соотношениях (15) при $n = n_s$ вектор u^{n_s} надо заменить на \tilde{u}_s^n из (17). Данный метод, который мы назовем LSM-CR, можно в свою очередь улучшить, если полученные рестартовые итерационные приближения еще раз ускорить с помощью того же метода наименьших квадратов по формулам (9)–(14). Такой алгоритм с двукратным применением минимизации невязок обозначим ALSM-CR.

В рассматриваемом подходе индекс “ s ” можно рассматривать формально как номер некоторого итерационного процесса, в котором “межрестартовые” операции по формулам CR вида (15) реализуют специальный полиномиальный предобуславливатель [6].

Заметим, что между рестартами вместо метода сопряженных невязок можно использовать спектральный метод чебышевского ускорения, имеющий различные формы представления, одно из которых имеет вид, аналогичный (15). Мы его приведем для случая одного постоянного предобуславливателя $B_n^{(l)} = B$, которому на каждой итерации соответствует только один направляющий вектор p^n , а коэффициенты $\bar{\alpha}_n = \alpha_n, \bar{\beta}_n = \beta_n$ являются скалярами [2]:

$$s = 0, 1, \dots : r^{n_s} = f - Au^{n_s},$$

$$\begin{aligned}
& p^{n_s} = B^{-1}r^{n_s}, \quad n = n_s, n_s + 1, \dots, n_{s+1} - 1 : \\
& u^{n+1} = u^n + \alpha_n p^n, \quad p^{n+1} = B^{-1}r^{n+1} + \beta_n p^n, \\
& r^{n+1} = r^n - A\alpha_n p^n, \\
& \alpha_0 = \tau, \quad \alpha_n = \tau_n \tau, \quad \beta_n = (\tau_n - 1)\alpha_{n-1}\alpha_n, \quad \tau = 2/(\lambda_1 + \lambda_N), \\
& \tau_n = 2/\left[\lambda_N + \lambda_1 - (\lambda_N - \lambda_1) \cos \frac{(2n-1)\pi}{2m}\right], \\
& n = 1, \dots, m_1 = n_{s+1} - n_s,
\end{aligned} \tag{18}$$

где величины λ_1 и λ_N , которые предполагаются вещественными, положительными и известными, – это минимальное и максимальное собственные значения матрицы $B^{-1}A$. Во многих приложениях они могут быть оценены с достаточной для практики точностью. Алгоритм, получаемый после комбинирования чебышевских итераций (18) с коррекцией рестартовых приближений по формулам наименьших квадратов (9)–(14), обозначим LSM-CH. Данный итерационный процесс, по аналогии с ALSM-CR, можно дополнительно ускорить, используя линейные комбинации рестартов с помощью соотношений (16)–(17), в результате чего получаем метод ALSM-CH, который формально определяет последовательные приближения также в подпространствах Крылова.

Теорема 2. Пусть алгоритмы ALSM-CR и ALSM-CH определяются для межрестартовых итераций с постоянной длиной периода $m_r^{(s)} = m_r$ из рекуррентных соотношений (15) и (18) соответственно. Если рестартовые приближения u^{n_s} при этом дважды корректируются по формулам метода наименьших квадратов (9)–(14) и (16)–(17), то данные итерационные процессы обеспечивают минимизацию невязок в подпространствах Крылова

$$\mathcal{K}_{M_s}(r^0, A, B^{-1}) = \text{Span}(r^0, AB^{-1}r^0, \dots, (AB^{-1})_s^M r^0), \quad M_s = sm_r. \tag{19}$$

Замечание 2. Рассматриваемые способы ускорения итераций с помощью метода наименьших квадратов можно интерпретировать как неявные алгоритмы в подпространствах Крылова. Их важной характеристикой является высокая степень параллелизуемости, поскольку вычисленные элементы матриц B_s и \bar{B}_s из (13) и (17) может выполняться синхронно на разных процессорах. Кроме того, нахождение векторов \bar{c}_s и \check{c}_s из соответствующих СЛАУ малого размера $s \ll N$

одновременно в различных арифметических устройствах позволяет избегать лишних коммуникаций.

§3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АЛГОРИТМОВ

Эффективность предложенных алгоритмов мы рассмотрим на задаче Дирихле для диффузионно-конвективного уравнения

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + p \frac{\partial u}{\partial x} + q \frac{\partial u}{\partial y} = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad u|_{\Gamma} = g(x, y) \quad (20)$$

в квадратной расчетной области $\Omega = (0, 1)^2$ с границей Γ и конвективными коэффициентами p, q , которые для простоты считаем постоянными. Данная краевая задача аппроксимируется на квадратной сетке с шагом $h = 1/(L+1)$ и общим числом внутренних узлов $N = L^2$:

$$x_i = ih, \quad y_j = jh, \quad i, j = 0, 1, \dots, L+1,$$

с помощью пятиточечных конечно-объемных монотонных аппроксимаций экспоненциального типа, имеющих второй порядок точности. При этом решаемая СЛАУ предварительно масштабируется таким образом, что в проводимых нами экспериментах фактически решались нормализованные уравнения, получаемые из следующих преобразований с диагональной матрицей $D = \text{diag}\{a_{l,l}\}$:

$$\begin{aligned} D^{-1/2} A D^{-1/2} D^{1/2} u &= D^{-1/2} f, \\ \bar{A} \bar{u} &= \bar{f}, \quad \bar{A} = D^{-1/2} A D^{-1/2}, \quad \bar{u} = D^{1/2} u, \quad \bar{f} = D^{-1/2} f. \end{aligned} \quad (21)$$

Численные эксперименты проводились со стандартной двойной точностью для значений функций $f(x, y) = 0$ и $g(x, y) = 1$, соответствующих точному решению задачи (20) $u(x, y) = 1$. Поскольку скорость сходимости итераций зависит от начальной ошибки $u - u^0$, её влияние анализировалось путем сравнения результатов для разных начальных приближений $u^0 = 0$ и $u^0 = P_2(x, y) = x^2 + y^2$. Критерием окончания итераций служило условие $(r^n, r^n) \leq \varepsilon^2(f, f)$ при $\varepsilon = 10^{-7}$. Расчеты проводились на сетках с числом узлов $N = 7^2, 15^2, 31^2, 63^2$ и 127^2 со значениями длины периодов $m = 8, 16, 32, 64$ и 128 . Вычисления осуществлялись на ресурсах Сибирского суперкомпьютерного центра (ССКЦ ИВМиМГ СО РАН).

В приведенных ниже таблицах представлены результаты численного решения задачи (20) со значениями конвективных коэффициентов $p = q = 0$ и $p = q = 4$. В табл. 1–4 содержатся данные расчетов

для метода сопряженных невязок (8) без предобусловливателей (все $B_n^{(l)}$ суть единичные матрицы I) с двукратным применением алгоритма наименьших квадратов, который мы обозначаем ALSM-CR. В каждой клетке этих таблиц приводится по три числа (сверху вниз): число итераций n , итоговая норма невязки $\|r^n\|^2$ и абсолютная ошибка результата $\rho = \max\{|1 - u^n|\}$.

Таблица 1. Результаты экспериментов для метода ALSM-CR при $p = q = 4$, $u^0 = x^2 + y^2$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	35	31	63	127	255
	$2.1 \cdot 10^{-7}$	$6.7 \cdot 10^{-8}$	$1.4 \cdot 10^{-9}$	$5.2 \cdot 10^{-12}$	$4.1 \cdot 10^{-3}$
	$8.0 \cdot 10^{-14}$	$3.4 \cdot 10^{-14}$	$1.6 \cdot 10^{-17}$	$6.7 \cdot 10^{-22}$	$5.0 \cdot 10^{-24}$
15^2	50	65	94	127	255
	$1.4 \cdot 10^{-7}$	$6.9 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$2.9 \cdot 10^{-9}$	$3.4 \cdot 10^{-12}$
	$5.1 \cdot 10^{-14}$	$1.4 \cdot 10^{-13}$	$8.2 \cdot 10^{-14}$	$9.6 \cdot 10^{-18}$	$7.2 \cdot 10^{-23}$
31^2	85	101	135	190	255
	$2.1 \cdot 10^{-7}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	$8.1 \cdot 10^{-7}$	$4.9 \cdot 10^{-8}$	$7.28 \cdot 10^{-7}$
	$1.2 \cdot 10^{-13}$	$2.8 \cdot 10^{-13}$	$2.6 \cdot 10^{-13}$	$2.1 \cdot 10^{-15}$	$4.2 \cdot 10^{-14}$
63^2	158	176	201	294	382
	$1.6 \cdot 10^{-16}$	$2.6 \cdot 10^{-6}$	$3.4 \cdot 10^{-6}$	$5.8 \cdot 10^{-6}$	$1.6 \cdot 10^{-7}$
	$6.1 \cdot 10^{-13}$	$5.9 \cdot 10^{-13}$	$6.3 \cdot 10^{-13}$	$6.4 \cdot 10^{-13}$	$2.4 \cdot 10^{-15}$
127^2	302	330	349	386	582
	$1.9 \cdot 10^{-6}$	$6.1 \cdot 10^{-6}$	$5.6 \cdot 10^{-6}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$1.0 \cdot 10^{-5}$
	$6.8 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$1.3 \cdot 10^{-12}$	$1.3 \cdot 10^{-12}$

Как видно из результатов, количества итераций для симметричных и несимметричных СЛАУ являются достаточно близкими и слабо зависящими от начального приближения. При этом итоговые значения невязки и абсолютной ошибки численного решения оказываются приемлемыми и хорошо соответствующими критерию окончания итераций ε , что свидетельствует о достаточной устойчивости алгоритма. В зависимости от периодичности рестартов скорость сходимости итераций в разных экспериментах изменяется по-разному: или обнаруживает локальные экстремумы, или убывает с ростом m . Важно отметить, что введение второго уровня ускорения с помощью LSM значительно (до десяти раз) уменьшило количество итераций (это видно из сравнения с результатами работы [5], которые мы для краткости

Таблица 2. Результаты экспериментов для метода ALSM-CR при $p = q = 0$, $u^0 = x^2 + y^2$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	35	31	63	127	255
	$3.0 \cdot 10^{-7}$	$4.2 \cdot 10^{-8}$	$5.4 \cdot 10^{-9}$	$5.4 \cdot 10^{-9}$	$5.4 \cdot 10^{-9}$
	$6.9 \cdot 10^{-14}$	$1.7 \cdot 10^{-14}$	$6.2 \cdot 10^{-16}$	$6.2 \cdot 10^{-16}$	$6.2 \cdot 10^{-16}$
15^2	50	65	94	127	255
	$3.9 \cdot 10^{-8}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$3.1 \cdot 10^{-7}$	$8.8 \cdot 10^{-8}$	$8.8 \cdot 10^{-8}$
	$1.9 \cdot 10^{-14}$	$1.5 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-13}$	$1.4 \cdot 10^{-13}$	$1.4 \cdot 10^{-13}$
31^2	76	98	129	83	80
	$7.2 \cdot 10^{-7}$	$3.0 \cdot 10^{-6}$	$2.8 \cdot 10^{-6}$	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$2.4 \cdot 10^{-7}$
	$2.5 \cdot 10^{-13}$	$3.0 \cdot 10^{-13}$	$2.8 \cdot 10^{-13}$	$2.7 \cdot 10^{-13}$	$3.3 \cdot 10^{-13}$
63^2	141	151	190	259	160
	$4.9 \cdot 10^{-7}$	$5.5 \cdot 10^{-7}$	$2.7 \cdot 10^{-6}$	$6.5 \cdot 10^{-6}$	$2.6 \cdot 10^{-6}$
	$3.3 \cdot 10^{-13}$	$4.6 \cdot 10^{-13}$	$6.5 \cdot 10^{-13}$	$6.3 \cdot 10^{-13}$	$5.5 \cdot 10^{-13}$
127^2	267	286	301	378	495
	$2.2 \cdot 10^{-6}$	$2.2 \cdot 10^{-6}$	$4.0 \cdot 10^{-6}$	$2.1 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^{-5}$
	$9.0 \cdot 10^{-13}$	$9.9 \cdot 10^{-13}$	$1.3 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$

Таблица 3. Результаты экспериментов для метода ALSM-CR при $p = q = 0$, $u^0 = 0$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	15	10	10	10	10
	$3.3 \cdot 10^{-16}$				
	$1.4 \cdot 10^{-30}$	$2.0 \cdot 10^{-33}$	$2.0 \cdot 10^{-33}$	$2.0 \cdot 10^{-33}$	$2.0 \cdot 10^{-33}$
15^2	43	48	28	28	28
	$5.9 \cdot 10^{-8}$	$3.0 \cdot 10^{-7}$	$2.4 \cdot 10^{-8}$	$2.4 \cdot 10^{-8}$	$2.4 \cdot 10^{-8}$
	$4.4 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-13}$	$5.1 \cdot 10^{-14}$	$5.1 \cdot 10^{-14}$	$5.1 \cdot 10^{-14}$
31^2	64	93	95	58	58
	$4.6 \cdot 10^{-7}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$6.5 \cdot 10^{-7}$	$6.6 \cdot 10^{-8}$	$6.6 \cdot 10^{-8}$
	$2.8 \cdot 10^{-13}$	$3.0 \cdot 10^{-13}$	$2.5 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-13}$
63^2	102	123	200	190	110
	$9.9 \cdot 10^{-7}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	$7.4 \cdot 10^{-6}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$4.5 \cdot 10^{-7}$
	$6.1 \cdot 10^{-13}$	$5.6 \cdot 10^{-13}$	$5.9 \cdot 10^{-13}$	$3.7 \cdot 10^{-13}$	$3.9 \cdot 10^{-13}$
127^2	190	208	231	382	377
	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-6}$	$4.8 \cdot 10^{-6}$	$4.9 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$
	$8.9 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$1.3 \cdot 10^{-12}$

Таблица 4. Результаты экспериментов для метода ALSM-CR при $p = q = 4$, $u^0 = 0$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	36	33	63	127	130
	$1.3 \cdot 10^{-8}$	$7.2 \cdot 10^{-8}$	$2.3 \cdot 10^{-9}$	$3.3 \cdot 10^{-11}$	$9.0 \cdot 10^{-8}$
	$6.3 \cdot 10^{-15}$	$3.9 \cdot 10^{-14}$	$4.5 \cdot 10^{-17}$	$2.1 \cdot 10^{-20}$	$4.9 \cdot 10^{-14}$
15^2	51	76	81	127	255
	$2.3 \cdot 10^{-7}$	$7.3 \cdot 10^{-8}$	$7.8 \cdot 10^{-7}$	$7.6 \cdot 10^{-9}$	$7.3 \cdot 10^{-11}$
	$1.2 \cdot 10^{-13}$	$1.7 \cdot 10^{-14}$	$1.6 \cdot 10^{-13}$	$3.9 \cdot 10^{-16}$	$2.7 \cdot 10^{-20}$
31^2	85	104	128	190	255
	$2.4 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$2.4 \cdot 10^{-6}$	$4.2 \cdot 10^{-7}$	$2.2 \cdot 10^{-8}$
	$1.7 \cdot 10^{-13}$	$2.9 \cdot 10^{-13}$	$3.1 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-14}$	$5.0 \cdot 10^{-16}$
63^2	161	180	205	312	382
	$1.9 \cdot 10^{-6}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$	$3.6 \cdot 10^{-6}$	$5.8 \cdot 10^{-6}$	$5.6 \cdot 10^{-7}$
	$5.7 \cdot 10^{-13}$	$5.0 \cdot 10^{-13}$	$6.3 \cdot 10^{-13}$	$6.2 \cdot 10^{-13}$	$6.3 \cdot 10^{-15}$
127^2	302	331	350	403	509
	$2.4 \cdot 10^{-6}$	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$7.8 \cdot 10^{-6}$	$8.7 \cdot 10^{-6}$	$4.2 \cdot 10^{-6}$
	$8.8 \cdot 10^{-13}$	$6.3 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$4.9 \cdot 10^{-13}$

не приводим). В табл. 5–8 приводятся аналогичные данные для метода ALSM-CH, в котором между рестартами итерации проводятся по формулам чебышевского ускорения (18).

При этом для задач с нулевой и ненулевой конвекцией использовались значения границ спектра λ_1 и λ_N для модельных сеточных уравнений Лапласа, однако проведенные дополнительные расчеты демонстрируют слабую зависимость числа итераций от точности задания λ_1 , если λ_N выбирать из естественной оценки нормы матриц A . Для данного алгоритма, как показывает сравнение с работой [5], введение двойного ускорения с помощью LSM также дает значительное ускорение итераций. Например, в табл. 8 при $N = 127^2$ и $m = 8$ для метода ALSM-CH мы имеем 216 итераций, а без повторного LSM-ускорения (см. табл. 5 из [5]) соответствующее число итераций равно $n = 3987$.

§4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как видно из представленных предварительных расчетных результатов, предложенная двухуровневая минимизация невязок является перспективным подходом к ускорению итерационных методов с рестартами при решении несимметричных СЛАУ. Помимо сокращения

Таблица 5. Результаты экспериментов для метода
ALSM-CH при $p = q = 0$, $u^0 = x^2 + y^2$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	37	29	32	44	44
	$2.2 \cdot 10^{-7}$	$4.5 \cdot 10^{-8}$	$6.7 \cdot 10^{-15}$	$1.0 \cdot 10^{-7}$	$1.2 \cdot 10^{-7}$
	$7.9 \cdot 10^{-14}$	$4.2 \cdot 10^{-14}$	$1.3 \cdot 10^{-27}$	$3.1 \cdot 10^{-14}$	$4.3 \cdot 10^{-14}$
15^2	56	72	64	64	88
	$7.3 \cdot 10^{-8}$	$4.5 \cdot 10^{-7}$	$3.5 \cdot 10^{-8}$	$4.1 \cdot 10^{-8}$	$1.6 \cdot 10^{-7}$
	$1.9 \cdot 10^{-14}$	$9.6 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-14}$	$4.0 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-13}$
31^2	88	112	144	127	160
	$8.1 \cdot 10^{-8}$	$1.3 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-7}$	$9.8 \cdot 10^{-8}$	$1.1 \cdot 10^{-7}$
	$3.4 \cdot 10^{-14}$	$2.7 \cdot 10^{-13}$	$2.5 \cdot 10^{-13}$	$2.7 \cdot 10^{-13}$	$1.6 \cdot 10^{-13}$
63^2	160	160	224	288	249
	$5.9 \cdot 10^{-7}$	$7.5 \cdot 10^{-7}$	$1.1 \cdot 10^{-6}$	$2.5 \cdot 10^{-6}$	$5.5 \cdot 10^{-7}$
	$3.3 \cdot 10^{-13}$	$4.6 \cdot 10^{-13}$	$1.1 \cdot 10^{-13}$	$4.4 \cdot 10^{-13}$	$5.1 \cdot 10^{-13}$
127^2	304	304	320	384	512
	$2.2 \cdot 10^{-6}$	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$6.9 \cdot 10^{-7}$	$2.9 \cdot 10^{-6}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$
	$9.0 \cdot 10^{-13}$	$9.9 \cdot 10^{-13}$	$1.0 \cdot 10^{-13}$	$3.7 \cdot 10^{-13}$	$7.5 \cdot 10^{-13}$

Таблица 6. Результаты экспериментов для метода
ALSM-CH при $p = q = 4$, $u^0 = x^2 + y^2$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	38	32	32	48	48
	$9.0 \cdot 10^{-8}$	$1.9 \cdot 10^{-9}$	$3.1 \cdot 10^{-12}$	$2.8 \cdot 10^{-8}$	$5.2 \cdot 10^{-8}$
	$7.0 \cdot 10^{-14}$	$2.2 \cdot 10^{-17}$	$3.3 \cdot 10^{-22}$	$5.0 \cdot 10^{-15}$	$8.4 \cdot 10^{-15}$
15^2	56	79	64	80	96
	$1.4 \cdot 10^{-7}$	$1.2 \cdot 10^{-7}$	$1.0 \cdot 10^{-8}$	$8.8 \cdot 10^{-8}$	$6.0 \cdot 10^{-8}$
	$5.1 \cdot 10^{-14}$	$2.5 \cdot 10^{-14}$	$2.6 \cdot 10^{-16}$	$7.2 \cdot 10^{-14}$	$2.7 \cdot 10^{-14}$
31^2	96	112	158	128	160
	$2.1 \cdot 10^{-7}$	$1.7 \cdot 10^{-7}$	$3.1 \cdot 10^{-7}$	$7.9 \cdot 10^{-9}$	$3.1 \cdot 10^{-7}$
	$1.2 \cdot 10^{-13}$	$3.3 \cdot 10^{-14}$	$2.9 \cdot 10^{-13}$	$8.6 \cdot 10^{-17}$	$1.7 \cdot 10^{-13}$
63^2	184	192	224	256	256
	$5.0 \cdot 10^{-7}$	$3.2 \cdot 10^{-7}$	$8.5 \cdot 10^{-8}$	$2.2 \cdot 10^{-6}$	$2.0 \cdot 10^{-8}$
	$1.4 \cdot 10^{-13}$	$6.9 \cdot 10^{-14}$	$6.2 \cdot 10^{-15}$	$6.4 \cdot 10^{-13}$	$5.2 \cdot 10^{-17}$
127^2	344	352	384	384	512
	$1.9 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{-6}$	$5.1 \cdot 10^{-7}$	$6.4 \cdot 10^{-6}$	$2.1 \cdot 10^{-6}$
	$6.8 \cdot 10^{-13}$	$4.6 \cdot 10^{-13}$	$5.1 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-12}$	$9.8 \cdot 10^{-14}$

Таблица 7. Результаты экспериментов для метода
ALSM-CH при $p = q = 4$, $u^0 = 0$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	40	32	32	48	48
	$1.3 \cdot 10^{-8}$	$8.7 \cdot 10^{-10}$	$1.5 \cdot 10^{-12}$	$3.5 \cdot 10^{-8}$	$4.7 \cdot 10^{-8}$
	$6.3 \cdot 10^{-15}$	$9.8 \cdot 10^{-18}$	$7.2 \cdot 10^{-23}$	$4.8 \cdot 10^{-15}$	$7.9 \cdot 10^{-15}$
15^2	57	80	64	80	96
	$2.4 \cdot 10^{-7}$	$7.2 \cdot 10^{-8}$	$1.5 \cdot 10^{-8}$	$7.0 \cdot 10^{-8}$	$5.9 \cdot 10^{-8}$
	$1.4 \cdot 10^{-13}$	$1.6 \cdot 10^{-14}$	$8.3 \cdot 10^{-16}$	$5.8 \cdot 10^{-14}$	$2.7 \cdot 10^{-14}$
31^2	96	112	160	128	161
	$2.4 \cdot 10^{-7}$	$2.6 \cdot 10^{-7}$	$5.9 \cdot 10^{-7}$	$2.2 \cdot 10^{-8}$	$3.6 \cdot 10^{-7}$
	$1.7 \cdot 10^{-13}$	$5.9 \cdot 10^{-14}$	$1.5 \cdot 10^{-13}$	$7.1 \cdot 10^{-16}$	$1.9 \cdot 10^{-13}$
63^2	184	192	224	256	256
	$7.0 \cdot 10^{-7}$	$3.1 \cdot 10^{-7}$	$4.3 \cdot 10^{-7}$	$2.5 \cdot 10^{-6}$	$5.0 \cdot 10^{-8}$
	$1.9 \cdot 10^{-13}$	$1.0 \cdot 10^{-13}$	$2.5 \cdot 10^{-14}$	$3.9 \cdot 10^{-13}$	$5.8 \cdot 10^{-16}$
127^2	344	352	384	448	512
	$2.4 \cdot 10^{-6}$	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$3.5 \cdot 10^{-6}$	$5.4 \cdot 10^{-6}$	$7.1 \cdot 10^{-7}$
	$8.8 \cdot 10^{-13}$	$6.3 \cdot 10^{-13}$	$1.1 \cdot 10^{-12}$	$6.0 \cdot 10^{-13}$	$1.4 \cdot 10^{-14}$

Таблица 8. Результаты экспериментов для метода
ALSM-CH при $p = q = 0$, $u^0 = 0$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128
7^2	24	16	32	44	44
	$2.4 \cdot 10^{-8}$	$8.9 \cdot 10^{-15}$	$9.0 \cdot 10^{-15}$	$3.2 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-8}$
	$2.8 \cdot 10^{-14}$	$3.7 \cdot 10^{-27}$	$6.1 \cdot 10^{-27}$	$6.1 \cdot 10^{-15}$	$4.1 \cdot 10^{-15}$
15^2	48	61	32	64	88
	$1.0 \cdot 10^{-7}$	$2.1 \cdot 10^{-7}$	$8.3 \cdot 10^{-9}$	$2.0 \cdot 10^{-15}$	$8.4 \cdot 10^{-8}$
	$4.4 \cdot 10^{-14}$	$1.7 \cdot 10^{-13}$	$7.8 \cdot 10^{-13}$	$4.3 \cdot 10^{-28}$	$1.5 \cdot 10^{-13}$
31^2	80	112	112	89	160
	$1.7 \cdot 10^{-7}$	$4.5 \cdot 10^{-7}$	$2.0 \cdot 10^{-7}$	$3.2 \cdot 10^{-8}$	$6.1 \cdot 10^{-8}$
	$1.5 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-13}$	$2.2 \cdot 10^{-13}$	$4.2 \cdot 10^{-14}$	$1.6 \cdot 10^{-13}$
63^2	120	144	224	192	224
	$1.4 \cdot 10^{-7}$	$6.4 \cdot 10^{-7}$	$1.6 \cdot 10^{-7}$	$1.4 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{-7}$
	$5.1 \cdot 10^{-14}$	$3.6 \cdot 10^{-13}$	$2.5 \cdot 10^{-14}$	$3.7 \cdot 10^{-13}$	$1.0 \cdot 10^{-13}$
127^2	216	224	256	448	384
	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$3.9 \cdot 10^{-7}$	$4.6 \cdot 10^{-7}$	$1.9 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$
	$9.0 \cdot 10^{-13}$	$1.4 \cdot 10^{-13}$	$5.2 \cdot 10^{-14}$	$2.0 \cdot 10^{-13}$	$9.3 \cdot 10^{-14}$

количества итераций, осуществляется значительная экономия вычислительных ресурсов. В наибольшей степени повышение эффективности касается комбинирования спектрального алгоритма чебышевского ускорения и двукратного использования метода наименьших квадратов в подпространствах Крылова. Имеется также большой потенциал в значительном повышении производительности при параллельной реализации рассмотренных алгоритмов на основе использования гибридного программирования для достижения масштабируемого распараллеливания на МВС с распределенной и иерархической общей памятью. Мы в данной работе не использовали никаких предобуславливающих процедур, что представляет еще дополнительный резерв ускорения алгоритмов для решения больших алгебраических систем в практических задачах. Естественно, данные выводы имеют предварительный характер, а рассматриваемые подходы требуют дополнительных теоретических исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear System*, PWS Publ, NY, 2002.
2. В. П. Ильин, *Методы и технологии конечных элементов*, ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 2007.
3. В. П. Ильин, *О проблемах параллельного решения больших СЛАУ*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **439** (2015), 112–127.
4. Ч. Лоусон, Р. Хенсон, *Численное решение задач методом наименьших квадратов*, Наука, М., 1986.
5. В. П. Ильин, *О методах наименьших квадратов в подпространствах Крылова*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **453** (2016), 131–147.
6. D. R. O’Leary, *Yet another polynomial preconditioner for the conjugate gradient algorithm*. — Linear Algebra Appl. **154-156** (1991), 377–388.

Il'in V. P. Two-level least squares methods in Krylov subspaces.

Two-level least squares acceleration approaches are applied to Chebyshev acceleration and conjugate residual method with restarts for solving systems of linear algebraic equations with sparse nonsymmetric matrices arising in finite volume or finite element approximations of boundary value problems on irregular grids. Application of the proposed idea to other

iterative restarted processes also is considered. The efficiency of the algorithms proposed is investigated numerically on a set of model Dirichlet problems for the convection-diffusion equation.

Институт вычислительной
математики и математической
геофизики СО РАН,
Лаврентьева 6,
630090, Новосибирск

Поступило 1 ноября 2017 г.

Новосибирский
государственный университет, Пирогова 2,
630090, Новосибирск
E-mail: ilin@sscc.ru