

УДК 519.6

ОБ ИТЕРАЦИОННОМ МЕТОДЕ КАЧМАЖА И ЕГО ОБОБЩЕНИЯХ^{*)}

В. П. Ильин

Рассматривается семейство проекционных итерационных методов, ведущих свое начало от работы С. Качмажа 1937 г. Предлагаются альтернирующие блочные алгоритмы типа Качмажа с релаксационным параметром и ускорением в подпространствах Крылова. Приводятся и обсуждаются результаты численных экспериментов для модельных задач.

Введение. В 1937 году в работе [1] польским математиком С. Качмажем был предложен итерационный алгоритм для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$Au = f, \quad A = \{a_{i,j}\}, \quad u = \{u_i\}, \quad f = \{f_i\}, \quad i, j = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

с вещественными векторами u , f и невырожденной, в общем случае несимметричной матрицей A . (Алгоритм был повторно опубликован на английском языке в 1993 г. [2].) Этот метод достаточно известен среди инженеров и специалистов по математической экономике и оптимальному управлению (см., например, [3–5] и цитируемую там литературу). Однако удивительным является то, что несмотря на свою прозрачность, концептуальность и оригинальность он практически не известен в линейной алгебре и даже не упоминается в основных монографиях и учебниках по вычислительной математике (исключением является описание в [6] данного алгоритма, без указания его автора, как примера сходящегося вычислительного процесса).

Если обозначить через A_i i -ю строку матрицы A , в результате чего систему (1) можно переписать в виде

$$(Au)_i = (u, A_i^t) = A_i u = f_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

то метод Качмажа определяется следующим образом (в (2) A_i^t обозначает транспонированный к A_i вектор-столбец, а $(\cdot, \cdot)$ — обычное векторное скалярное произведение).

Пусть $u^{n-1} = \{u_i^{n-1}\}$ есть вектор $(n-1)$ -го итерационного приближения, который также переобозначим как $u^{n,0}$ ($u_i^0 = u_i^{1,0}$ суть произвольно заданные начальные значения искомых компонент). Тогда новая n -я итерация u^n определяется за N последовательных шагов:

$$u^{n,i} = u^{n,i-1} + A_i^t r_i^{n,i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad u^n = u^{n,N}, \quad (3)$$

где $r_i^{n,i-1} = f - A_i u^{n,i-1}$ — вектор невязки соответствующего приближения. В формуле (3) предполагается, что исходная система нормирована по условию

$$A_i A_i^t = (A_i^t, A_i^t) = \sum_{j=1}^N a_{i,j}^2 = 1, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4)$$

^{*)} Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 05-01-10487) и NWO-RFBR (проект 047.016.008).

Отметим, что метод Качмажа алгоритмически несколько напоминает итерационный метод Гаусса — Зейделя или последовательной верхней релаксации с параметром $\omega = 1$ (распространенное название — метод SOR от английского Successive Over Relaxation). Однако в последнем на каждой (n, i) -й «микро-итерации» пересчитывается только одна i -я компонента искомого вектора [7], а в (3) — n_i компонент, где n_i есть количество ненулевых элементов в матричной строке A_i . При этом каждая i -я компонента на одной n -й итерации пересчитывается столько раз, сколько ненулевых элементов в i -м столбце матрицы A .

Данный алгоритм имеет простую геометрическую интерпретацию. Каждое из уравнений вида (2) в N -мерном вещественном пространстве R^N представляет собой гиперплоскость. Если исходная система невырождена, то все гиперплоскости имеют общую единственную точку пересечения, являющуюся решением u . Если $u^{n-1} = u^{n,0}$ — точка некоторого заданного приближения, то в методе (3) $u^{n,1}$ означает ортогональную проекцию $u^{n,0}$ на первую гиперплоскость, $u^{n,2}$ есть проекция точки $u^{n,1}$ на вторую гиперплоскость и т. д. Конечная точка $u^{n,N}$ в этой последовательности принимается за новое итерационное приближение $u^n = \{u_i^n = u_i^{n+1,0}\}$, и далее процесс повторяется. Из общих геометрических соображений качественно ясно, что последовательность точек $u^{n,i}$ сходится к своему пределу u . Строгое доказательство сходимости итераций при условии невырожденности матрицы A проводится в [1, 2] с помощью проверки убывания функционала ошибки. Отметим также, что сходимость данного проекционного метода показана в [8] даже для вырожденных и несовместных систем, в том числе с прямоугольными комплексными матрицами A (в этом случае транспонированная матрица A^t заменяется на сопряженную).

Структура данной работы следующая. В п. 2 мы рассмотрим некоторые обобщения метода Качмажа, а также теоремы о сходимости соответствующих итерационных процессов. В п. 3 приводятся примеры численных экспериментов по решению СЛАУ высокого порядка с разреженными матрицами, возникающими из сеточных аппроксимаций краевых задач.

1. Некоторые теоремы и обобщения метода Качмажа. Предположим, что порядок матрицы кратен целому числу m , т. е. $N = lm$, и обозначим через u_p , f_p и A_p , $p = 1, 2, \dots, l$, подвекторы порядка m и прямоугольные подматрицы размера $m \times n$:

$$f_p = \{f_i, i = (p-1)m + 1, \dots, pm\}, \quad A_p = \{A_i, i = (p-1)m + 1, \dots, pm\}. \quad (5)$$

Тогда система уравнений (1) может быть записана в блочной форме, аналогичной (2):

$$A_p u = f_p, \quad p = 1, 2, \dots, l. \quad (6)$$

Для ее решения рассмотрим итерационный процесс, являющийся параметризованным обобщением (3) и рассмотренного в [9] проекционного метода:

$$u^{n,p} = u^{n,p-1} + \omega A_p^+ r_p^{n,p-1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad p = 1, 2, \dots, l, \quad u^n = u^{n,l}. \quad (7)$$

Здесь $u^{0,0} = \{u_i^0, i = 1, 2, \dots, N\}$ — произвольный начальный вектор, ω — некоторый числовой итерационный параметр, $r_p^{n,p-1} = f_p - A_p u^{n,p-1}$ — подвектор невязки m -го порядка, а A_p^+ — псевдообратная к A_p матрица, определяемая однозначно формулой

$$A_p^+ = A_p^t (A_p A_p^t)^{-1}, \quad (8)$$

если A_p имеет полный ранг m , и обладающая следующими необходимыми для нас свойствами [9]:

$$(A_p^+ A_p)^t A_p^+ A_p = (A_p^+ A_p)^2 = A_p^+ A_p. \quad (9)$$

Отсюда, в частности, следует, что $I - A_p^+ A_p$ является симметричной положительно полуопределенной матрицей ортогонального проектирования (I — единичная матрица) на p -е подпространство, геометрически представляемое объединением подпространств, определяемых строками A_i , $i = (p-1)m+1, \dots, pm-1, pm$. Введем, далее, векторы ошибок $z^{n,p} = u - u^{n,p}$, связанные с соответствующими подвекторами невязок соотношениями $A_p z^{n,p} = r_p^{n,p}$ и удовлетворяющие для всех n равенствам

$$z^{n,p} = z^{n,p-1} - \omega A_p^+ A_p z^{n,p-1}, \quad p = 1, 2, \dots, l. \quad (10)$$

Из (10) следуют соотношения

$$(z^{n,p}, z^{n,p}) = (z^{n,p-1}, z^{n,p-1}) - 2\omega(A_p^+ A_p z^{n,p-1}, z^{n,p-1}) + \omega^2(A_p^+ A_p z^{n,p-1}, A_p^+ A_p z^{n,p-1}),$$

откуда с помощью (9) получаем равенства

$$(z^{n,p}, z^{n,p}) = (z^{n,p-1}, z^{n,p-1}) - \omega(2 - \omega)(A_p^+ A_p z^{n,p-1}, z^{n,p-1}) = (z^{n,p-1}, z^{n,p-1}) - 2(2 - \omega)((A_p A_p^t)^{-1} r_p^{n,p}, r_p^{n,p}). \quad (11)$$

Теорема 1. Если матрица A невырождена, матрицы A_p , $p = 1, \dots, l$, имеют полный ранг и $0 < \omega < 2$, то итерационный процесс сходится.

Доказательство очевидным образом следует из того, что последовательность функционалов $(z^{n,p}, z^{n,p})$ ограничена снизу нулем, а все матрицы A_p имеют ранг m и матрицы $A_p A_p^t$ положительно определены, т. е. $z^{n,p} \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. $\square$

Итерационный метод (7) может быть записан в следующей матричной форме:

$$u^n = B u^{n-1} + g, \quad B = (I - T_l)(I - T_{l-1}) \dots (I - T_1), \quad g = (I - B)A^{-1}f, \quad (12)$$

а для векторов ошибки $z^n = z^{n,l}$ из (10) следуют соотношения

$$z^n = (I - T_l)(I - T_{l-1}) \dots (I - T_1) z^{n-1} = B z^{n-1}, \quad (13)$$

где $T_p = \omega A_p^+ A_p$, $p = 1, 2, \dots, l$.

В работе [10] исследованы проекционные алгоритмы мультипликативного типа вне всякой связи с рассмотрением метода Качмажа, для которых итерационный процесс записывается в форме (12), а также доказано следующее утверждение.

Теорема 2. Пусть для любого вектора $v \in R^N$ выполняются неравенства

$$\frac{(T_p v, v)}{(v, v)} \leq \alpha < 2, \quad p = 1, 2, \dots, l; \quad \|v\| \leq \beta \sum_{p=1}^l (T_p v, v).$$

Тогда для евклидовой нормы B из (13) справедлива оценка $\|B\| \leq \gamma$, где γ определяется соотношением

$$\gamma = 1 - \frac{2 - \alpha}{\beta[l + \alpha^2 l(l-1)/2]}$$

или формулой

$$\gamma = 1 - \frac{2 - \alpha}{2\beta[1 + \alpha^2 l(l-1)/2]}.$$

Отсюда, в частности, следует, что если матрицы $\bar{T}_p = \omega^{-1}T_p$ для всех p удовлетворяют условиям

$$\frac{(\bar{T}_p v, v)}{(v, v)} \leq \bar{\alpha} < 2, \quad \|v\| \leq \bar{\beta} \sum_{p=1}^l (T_p v, v),$$

то при выборе $\omega = (\bar{\alpha} \sqrt{(l-1)l})^{-1}$ получаем

$$\gamma = 1 - (3\bar{\beta}\bar{\alpha}l)^{-1}. \quad (14)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Отметим, что в работе [9] для блочного метода Качмажа (7) с $\omega = 1$ сделано также следующее обобщение: прямоугольные подматрицы A_p могут содержать разное количество строк, не обязательно следующих друг за другом. Очевидно, что данный подход может быть предложен и при использовании итерационного параметра $\omega \neq 1$. Более того, определение итерационных шагов $u^n = u^{n,l}$ является необязательным, и вычислительный процесс можно представить как расчет «микроитераций»

$$u^p = u^{p-1} + \omega A_p^+ r_p^{p-1}, \quad p = 1, 2, \dots$$

Для сходимости таких приближений необходимо только, чтобы в последовательности матриц $A_1^+, A_2^+, \dots$ участвовали все строки исходной матрицы.

Сформулируем теперь утверждение, являющееся обобщением теоремы о сходимости метода Качмажа из работы [8] на случай блочного проекционного метода (7) при $\omega = 1$.

Теорема 3. Пусть в системе уравнений (1) $N = lm$, а матрица A и вектор f представимы в блочном виде (5). Тогда итерационный процесс (7), (12) при $\omega = 1$ сходится для любого начального приближения u^0 , причем

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u^n = P_K u^0 + A^+ f,$$

где P_K — оператор ортогонального проектирования на ядро матрицы A , а A^+ — псевдообратная к ней матрица.

Доказательство дословно повторяет рассуждения из работы [8] и основывается на следующих утверждениях:

- для евклидовой нормы матрицы перехода B справедливо неравенство $\|B\| \leq 1$;
- соотношения $\|Bv\| = \|v\|$, $Bv = v$ справедливы, если и только если вектор v принадлежит ядру матрицы A , т. е. $v \in \mathcal{K}(A)$;
- ядро $\mathcal{K}(A)$ и образ транспонированной матрицы $J(A^t)$ инвариантны относительно матрицы перехода B , т. е. $B = P_K \oplus BP_K$ и $P_K BP_K = BP_K P_K$, причем справедливо неравенство $\|BP_K\| < 1$. $\square$

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Важно подчеркнуть, что данный результат справедлив и для несимметричной, и для вырожденной, и даже для несовместной системы. Прямоугольные матрицы A_p могут быть не полного ранга, в этом случае не применима формула (8) для псевдообратной матрицы A_p^+ . Более того, теорема 3 выполняется фактически для произвольной системы линейных алгебраических уравнений, в том числе с комплексной и прямоугольной матрицей.

Рассмотрим теперь блочный альтернирующий метод Качмажа, формально соответствующий переходу от блочного метода SOR к блочному же методу

симметричной последовательной верхней релаксации (SSOR), в котором каждая итерация состоит из двух полушагов. Первый из них заключается в обычной реализации формулы (7), а второй в выполнении аналогичных вычислений в обратном порядке по индексу p :

$$\begin{aligned} u^{n+1/2,p} &= u^{n,p-1} + \omega A_p^+ r_p^{n,p-1}, \quad p = 1, 2, \dots, l, \\ u^{n+1/2} &= u^{n+1/2,l} = u^{n+1/2,l+1}, \\ u^{n+1,p} &= u^{n+1/2,p+1} + \omega A_p^+ r_p^{n+1/2,p+1}, \quad p = l, \dots, 2, 1, \quad u^{n+1} = u^{n+1,1}. \end{aligned} \quad (15)$$

Матрица перехода такого итерационного процесса есть произведение двух матриц $B = B_2 B_1$, где B_1 совпадает с B из формулы (13) и B_2 имеет аналогичный вид:

$$B_2 = (I - T_1)(I - T_2) \dots (I - T_l) = B_1^t. \quad (16)$$

Отметим, что в формулах (15) при $\omega = 1$ на втором полушаге вычисления $u^{n+1,p}$ можно начинать с $p = l - 1$, а не $p = l$ в силу свойств оператора ортогонального проектирования

$$(I - T_l)^2 = I - T_l, \quad B_2 B_1 = (I - T_1)(I - T_2) \dots (I - T_l)(I - T_{l-1}) \dots (I - T_l).$$

Аналогично на второй и каждой последующей итерациях вычисления $u^{n+1/2,p}$ целесообразно начинать не с $p = 1$, а с $p = 2$. Соответственно можно определить и альтернирующий метод Качмажа (АМК) для покомпонентного алгоритма (7), добавив к нему второй полушаг с убыванием i от N до единицы.

ЗАМЕЧАНИЕ 3. В книге [11] указано, что метод Качмажа эквивалентен алгоритму Гаусса — Зейделя относительно некоторого нового неизвестного вектора, получаемого после применения правой трансформации Гаусса к исходной системе. К этому утверждению можно сделать некоторые пояснения и обобщение.

Рассмотрим сначала покомпонентный вариант метода (7), соответствующий случаю $m = 1$:

$$u^{n,i} = u^{n,i-1} + \omega A_i^t (A_i A_i^t)^{-1} (f_i - A_i u^{n,i-1}), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (17)$$

являющийся параметрическим обобщением метода Качмажа (3), освобожденного от условия нормировки СЛАУ (4).

Введем в рассмотрение матрицу

$$B = A A^t = \left\{ b_{i,j} = A_i A_j^t = \sum_{k=1}^N a_{i,k} a_{j,k} \right\}, \quad (18)$$

с помощью которой исходная система (1) сводится к эквивалентному виду:

$$B v \equiv A A^t v = f, \quad A^t v = u. \quad (19)$$

Выпишем метод последовательной верхней релаксации для решения (19) в следующем виде:

$$\begin{aligned} v_i^{n,i} &= v_i^{n,i-1} + \omega (f_i - B_i v^{n,i-1}) / b_{i,i}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ v^n &= v^{n,N} = v^{n+1,0}, \quad v^0 = v^{1,0} = \{v_i^0 = v_i^{1,0}, i = 1, 2, \dots, N\}, \end{aligned} \quad (20)$$

предполагающем изменение только одной i -компоненты вектора $v^{n,i} = \{v_j^{n,i}, j = 1, 2, \dots, N\}$ за (n, i) -ю «микроитерацию». Если теперь учесть выражение для произведения N -мерного вектора $v^{n,i-1}$ на B_i — i -ю строку B :

$$B_i v^{n,i-1} = \sum_{j=1}^N A_i A_j^t v_j^{n,i-1}, \quad (21)$$

то после умножения каждого i -го уравнения (20) на вектор-столбец A_i^t мы можем заключить, что метод (20) порождает итерационный процесс (17) с итерационными приближениями

$$u^{n,i} = A^t v^{n,i} = A_i^t v_i^{n,i-1} + \omega A_i^t (A_i A_i^t)^{-1} \left(f_i - A_i \sum_{j=1}^N A_j^t v_j^{n,i-1} \right), \quad (22)$$

$$i = 1, 2, \dots, N, \quad u^{n,N} = u^n = A^t v^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Из проведенных построений следует аналогичное утверждение для блочно-го альтернирующего метода Качмажа. А именно, первый полушаг итерационного процесса (15) эквивалентен блочному методу последовательной верхней релаксации, примененному к системе уравнений (19), получаемой из исходной СЛАУ (1) после правой трансформации Гаусса. Данный алгоритм имеет вид, аналогичный (20):

$$v_p^{n,p} = v_p^{n,p-1} + \omega B_{p,p}^{-1} (f_p - B_p v^{n,p-1}), \quad p = 1, 2, \dots, l,$$

где $B_{p,p}$ и B_p суть соответственно блочный диагональный элемент и блочная строка матрицы

$$B = A A^t = \left\{ B_{p,q} = A_p A_q^t = \sum_{k=1}^l A_{p,k} A_{q,k}^t \right\},$$

а $v_p^{n,p}$ — подвекторы m -го порядка. Схожим образом определяется и второй полушаг в (15). Таким образом, метод (15) эквивалентен блочному методу симметричной последовательной верхней релаксации, примененному к симметричной СЛАУ (19).

Итерационный процесс (15), который мы формально запишем в виде

$$u^n = B u^{n-1} + \tilde{f}, \quad \tilde{f} = (I - B) A^{-1} f, \quad B = B_2 B_1, \quad (23)$$

можно ускорить с помощью метода сопряженных невязок (или каким-нибудь другим алгоритмом, основанном на подпространствах Крылова [12]) в силу симметричности матрицы перехода B . Действительно, если итерации сходятся к точному решению u , то оно удовлетворяет некоторой предобусловленной системе уравнений

$$\tilde{A} u \equiv (I - B) u = \tilde{f}, \quad (24)$$

для которой алгоритм записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} r^0 &= \tilde{f} - \tilde{A} u^0 = \tilde{f} - u^0 + B u^0, \quad p^0 = r^0, \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, \quad \alpha_n = (\tilde{A} r^n, r^n) / (\tilde{A} p^n, \tilde{A} p^n), \\ r^{n+1} &= r^n - \alpha_n \tilde{A} p^n, \quad p^{n+1} = r^{n+1} + \beta_n p^n, \\ \tilde{A} p^{n+1} &= \tilde{A} r^{n+1} + \beta_n \tilde{A} p^n, \quad \beta_n = (\tilde{A} r^{n+1}, r^{n+1}) / (\tilde{A} r^n, r^n). \end{aligned} \quad (25)$$

Отметим, что умножение на матрицу $\tilde{A}$ в (25) в соответствии с ее определением в (24) фактически соответствует выполнению одной итерации (23), т. е.

$$\tilde{A} r^n = r^n - B r^n. \quad (26)$$

Умножение на $\tilde{A}$ на каждой итерации осуществляется только один раз, поскольку векторы $\tilde{A} p^n$ связаны приведенным в (25) двучленным рекуррентным соотношением. Отметим, что в книге [13] метод (25) характеризуется

как неэкономичный, так как там ошибочно утверждается, что его реализация требует двукратного матрично-векторного умножения.

Окончание итераций в (23) осуществляется по выполнению условия

$$(r^n, r^n) \leq \varepsilon^2 (r^0, r^0), \quad (27)$$

где $\varepsilon \ll 1$ — задаваемая «итерационная точность», в частности, $r^0 = \tilde{f}$ при $u^0 = 0$.

Число итераций $n(\varepsilon)$, необходимых для обеспечения условия (27) в методе (25), оценивается неравенством

$$n(\varepsilon) \leq 1 + \ln \frac{1 + \sqrt{1 - \varepsilon^2}}{\varepsilon} \bigg/ \ln \frac{1 - \sqrt{m/M}}{1 + \sqrt{m/M}}, \quad (28)$$

где m и M — минимальное и максимальное собственные числа матрицы $\tilde{A}$ [12].

Рассматриваемый метод сопряженных невязок обладает тем вариационным свойством, что для произвольного начального приближения он минимизирует евклидову норму невязки r^n в подпространстве Крылова, натянутом на векторы $r^0, \tilde{A}r^0, \dots, \tilde{A}^{n-1}r^0$. При этом величина (r^n, r^n) , по которой и происходит контроль окончания итераций, с ростом n монотонно убывает (в отличие от «классического» метода сопряженных градиентов, для которого типичной ситуацией является пилообразное поведение нормы невязки, но зато есть некоторая экономия вычислений вследствие отличающихся от (25) формул для нахождения коэффициентов α_n, β_n :

$$\alpha_n = \frac{(r^n, r^n)}{(\tilde{A}p^n, p^n)}, \quad \beta_n = \frac{(r^{n+1}, r^{n+1})}{(r^n, r^n)},$$

избавляющих от реализации рекурсии для нахождения векторов $\tilde{A}p^n$).

Рассмотренный принцип ускорения альтернирующего метода Качмажа может быть обобщен следующим образом. Для описанного алгоритма сопряженных невязок (25) в качестве предобусловливателя использовалась одна итерация АМК. Естественно, вместо этого на каждой n -й итерации можно проводить по фиксированному числу k «внутренних» итераций, результат которых по аналогии с (23) можно записать в следующей форме:

$$u^k = B^k u^0 + (B^{k-1} + B^{k-2} + \dots + I)g, \quad g = (I - B)A^{-1}f.$$

Предельный вектор данной последовательности можно интерпретировать как решение уравнения

$$\tilde{A}u = (I - B^k)u = \tilde{f} = (I - B^k)A^{-1}f.$$

Таким образом, формально такой двухуровневый итерационный процесс сводится только к замене в (25) предобусловленной матрицы $\tilde{A}$ и вектора правой части $\tilde{f}$.

Если собственные числа матрицы B удовлетворяют условию

$$-1 + \delta \leq \lambda(B) \leq 1 - \delta, \quad 0 < \delta < 1,$$

то границы спектра матрицы $\tilde{A} = I - B^k$ в (28) при нечетных k определяются как

$$m = 1 - (1 - \delta)^k, \quad M = 1 + (1 - \delta)^k,$$

а при четных $M = 1$. Отсюда при $\delta \ll 1$ и $k = 2$ следует, например, что $m/M \approx (2 + \delta)^{-1} \delta^{-1}$, и оценка числа итераций $n(\varepsilon)$ в (28) будет в два раза меньше, чем при $k = 1$. Рассмотренный метод двойных итераций является одним из вариантов известного в литературе полиномиального предобусловливания (см. [13] и цитируемую там литературу).

2. Примеры численных экспериментов. Проиллюстрируем скорость сходимости итерационного альтернирующего метода Качмажа (25) в применении к системе сеточных семиточечных уравнений, аппроксимирующих задачу Дирихле для линейного диффузионно-конвективного уравнения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + p \frac{\partial u}{\partial x} + q \frac{\partial u}{\partial y} + r \frac{\partial u}{\partial z} = f(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \Omega, \quad (29)$$

$$u|_{\Gamma} = g(x, y, z)$$

в единичном кубе $\Omega = [0, 1]^3$ на кубической сетке с шагом $h = (N + 1)^{-1}$. Дискретизация задачи проводилась с помощью схемы экспоненциального типа [12]. Функции f и g в (29) выбирались из условия, что точное решение $u(x, y, z)$ равно единице. В качестве начального приближения выбиралась функция $u^0(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$, а точность итераций в условии (27) полагалась равной $\varepsilon = 10^{-7}$.

В табл. 1, 2 приведены количества итераций при разных значениях ω для трех сеток с числами шагов в одном измерении $N = 8, 16, 32$. Величины конвективных коэффициентов брались равными $p = q = r = 0$ и $p = q = r = 4$ соответственно.

Т а б л и ц а 1

Количество итераций для альтернирующего метода при $p = q = r = 0$

N	ω						
	1,0	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,8
8	31	27	26	25	24	25	32
16	94	85	81	76	71	66	67
32	299	258	242	224	207	196	169

Т а б л и ц а 2

Количество итераций для альтернирующего метода при $p = q = r = 4$

N	ω						
	1,0	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,8
8	29	26	24	23	23	24	30
16	89	80	77	71	66	62	63
32	304	256	234	214	196	182	158

С целью оценки эффективности введения второго альтернирующего полушага и ускорения итераций методом сопряженных невязок в табл. 3, 4 мы приводим количество итераций релаксированного одностороннего метода Качмажа (3) с итерационным параметром ω (этот множитель добавляется в (3) аналогично (7)) для решения аналогичных задач.

Т а б л и ц а 3

Количество итераций для релаксированного метода Качмажа при $p = q = r = 0$

N	ω						
	1,0	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,8
8	1059	665	482	395	335	238	300
16	13709	9035	7208	5604	4124	1244	1320

Т а б л и ц а 4

Количество итераций для релаксированного
метода Качмажа при $p = q = r = 0$

N	ω						
	1,0	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	1,8
8	801	579	480	388	300	206	250
16	7828	6312	5407	4529	3689	2883	1147

Для сравнения скорости сходимости альтернирующего блочного метода Качмажа с поточечным в табл. 5 для трех сеток и различных значений релаксационного параметра ω проводятся количества итераций при использовании разного числа блоков одинакового порядка (значения конвективных коэффициентов в (29) брались равными $p = q = r = 4$). Размер блока m выбирался равным числу внутренних узлов или в одной линии, или в одном слое соответствующей сетки, т. е. если число сеточных ячеек равно N^3 , то полагалось $m = N - 1$ или $m = (N - 1)^3$.

Т а б л и ц а 5

Количество итераций блочного альтернирующего
метода Качмажа при $p = q = r = 4$

N	m	ω					
		0,9	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8
8	7	24	23	20	19	20	26
	49	15	13	12	13	15	18
16	15	18	69	62	52	46	50
	225	43	38	33	29	28	34
32	31	239	217	183	155	130	117
	961	136	121	104	91	75	69

Отметим, что если количество блоков l в (15) единица, т. е. размер блока равен общему числу узлов сетки (и порядку СЛАУ) $m = (N - 1)^3$, то соответствующий алгоритм сходится за одну итерацию.

Закключение. Сравнение вышеприведенных результатов позволяет сделать следующие выводы.

1. Скорость сходимости итераций для рассмотренных алгоритмов слабо меняется при введении конвективных членов в исходное уравнение, нарушающих симметрию матрицы решаемой системы.

2. Введение релаксационного параметра ω значительно сокращает число итераций как в альтернирующем, так и в одностороннем методе Качмажа. Во всех случаях оптимальное значение итерационного параметра приближается к единице при измельчении шага сетки h или при увеличении числа узлов.

3. Качественный анализ зависимости числа итераций n от шага сетки h показывает, что в альтернирующем методе Качмажа с оптимальным ω и ускорением сопряженными невязками имеем $n \sim h^{-1,5}$. Для релаксационного параметра $\omega = 1$, а также в одностороннем варианте алгоритма при любых ω величина n с уменьшением h растет гораздо быстрее.

4. Экспериментальные результаты в табл. 1, 2 соответствуют теоретической оценке (28), поскольку для матрицы $\tilde{A}$ имеем

$$m = 1 - \gamma^2, \quad M = 1 + \gamma^2,$$

а γ определяется неравенством (14), причем в рассматриваемой трехмерной задаче $l = O(h^{-3})$.

5. Блочные варианты метода Качмажа значительно превосходят по скорости сходимости итераций поточечный алгоритм. Однако в силу большей трудоемкости выполнения одного итерационного шага вопрос о выборе оптимального варианта требует дополнительных исследований.

6. Альтернирующие методы Качмажа с ускорением значительно превосходят по экономичности односторонний классический вариант алгоритма. Однако даже наилучшие варианты рассматриваемых алгоритмов на апробированных тестовых примерах значительно уступают по эффективности известным методам неполной факторизации с ускорением сопряженными направлениями, в которых число итераций пропорционально величине $h^{-1/2}$ (см., например, [14], где приведены результаты численных экспериментов для аналогичных задач).

По-видимому, обобщенные методы Качмажа могут быть конкурентноспособными в силу своей исключительной универсальности на классе систем с «очень плохими» матрицами, где многие другие алгоритмы оказываются неприменимыми. Кроме того, перспективным является развитие и исследование блочных вариантов метода Качмажа, в которых включение специальных упорядочиваний неизвестных и «усиление неясности» могут значительно сократить общее число арифметических операций.

Важный методологический и практический аспект блочных методов Качмажа заключается в том, что они образуют замыкание множества итерационных алгоритмов в том смысле, что в пределе с увеличением порядков блоков ($A_p = A$, если блок только один) мы получаем прямой метод нахождения обобщенного решения для фактически произвольной СЛАУ.

ЗАМЕЧАНИЕ 4. В формулах (8), (11) и в теореме 1 предполагалось, что матрицы A_p имеют полный ранг и вследствие этого матрицы $A_p A_p^t$ имеют обратную. Однако и в противном случае формулы (15) для АМК легко реализуются, надо при этом только вычислять псевдообратные матрицы A_p^+ , например по формулам Гревилля [9]. Другой возможный путь к реализации метода (15) при вырожденности $A_p A_p^t$ — это решение вспомогательных систем уравнений вида

$$A_p v_p = r_p$$

каким-либо алгоритмом для задачи наименьших квадратов [15], который реализует фактически вычисление вектора $v_p = A_p^+ r_p$ (с помощью отражений Хаусхолдера, вращений Гивенса или модифицированного процесса ортогонализации Грама — Шмидта).

В заключение отметим, что рядом авторов (см., например, [16] и цитируемую там литературу) исследовались аддитивные проекционные методы для решения СЛАУ, основанные на геометрических подходах, близких к методу Качмажа, который является проекционным алгоритмом мультипликативного типа согласно классификации из работы [10]. Как там показано, аддитивные итерационные процессы обладают, вообще говоря, худшей скоростью сходимости. Однако очевидно, что одновременное нахождение проекций на разные гиперплоскости, на чем базируются проекционные аддитивные методы, позволяет особенно легко распараллеливать вычисления при их реализации на многопроцессорных компьютерных системах.

Автор благодарен А. В. Гаврилову за обсуждения рассматриваемых в статье вопросов, а также Е. А. Ицкович за проведение расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kaczmarz S. Angendherte Auflosung von Systemen Linearer Geichungen // Bull. Internat. Acad. Polonaise Sci. Lett. Gl. Sci. Math., Nat. A. 1937. P. 355–357.
2. Kaczmarz S. Approximate solution of systems of linear equations // Internat. J. Control. 1993. V. 57, N 6. P. 1269–1271.
3. Современная математика для инженеров. М.: Изд-во иностр. лит., 1959.
4. Крутиков В. Н., Петрова Т. В. Релаксационный метод минимизации с растяжением пространства в направлении субградиента // Экономика и мат. методы. 2003. Т. 39, № 1. С. 106–119.
5. Аведьян Э. Д., Цыпкин Я. З. Обобщенный алгоритм Качмажа // Автоматика и телемеханика. 1979. № 1. С. 72–78.
6. Воеводин В. В. Линейная алгебра. М.: Наука, 1974.
7. Вазов В., Форсайт Дж. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
8. Tanabe K. Projection method for solving a singular system of linear equation and its applications // Numer. Math. 1971. V. 17. P. 203–214.
9. Васильченко Г. П., Светланов А. А. Проекционный алгоритм решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1980. Т. 20, № 1. С. 3–10.
10. Bramble J. H., Pasciak J. E., Wang J., Xu J. Convergence estimates for product iterative methods with applications to domain decomposition // Math. Comp. 1991. V. 57, N 195. P. 1–21.
11. Hackbush W. Multigrid Methods and Applications. Berlin: Springer-Verl., 1985.
12. Ильин В. П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск: Изд-во Института математики, 2000.
13. Saad J. Iterative Methods for Spars Linear Systems. Boston: EPS, 1996.
14. Andreeva M. Yu., Il'in V. P., Itskovich E. A. Two solvers for nonsymmetric SLAE // Bull. Novosibirsk Comp. Center. Numer. Anal. 2004. V. 12, N 12. P. 1–16.
15. Golub G., Van Loan C. Matrix Computations. Baltimore: John Hopkins Univ. Press, 1989.
16. Appleby G., Smolarski D. C. A linear acceleration row action method for projecting onto subspaces // Electron. Trans. Numer. Anal. 2005. V. 20. P. 243–275.

Статья поступила 9 февраля 2006 г.

г. Новосибирск
Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН
E-mail: ilin@sccc.ru