ilin2007

УДК 519.632

О МЕТОДАХ ПОЛУСОПРЯЖЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ С ДИНАМИЧЕСКИМ ПРЕДОБУСЛОВЛИВАНИЕМ*)

В. П. Ильин, Е. А. Ицкович

Рассматриваются методы полусопряженных невязок и полусопряженных градиентов с динамическими предобусловливателями в подпространствах Крылова для решения систем линейных алгебраических уравнений с несимметричными матрицами. Исследуются их ортогональные и вариационные свойства. Предлагаются алгоритмы выбора внутренних итерационных параметров в предобусловливающих матрицах, соответствующих методам неполной факторизации. Эффективность получаемых итерационных процессов демонстрируется на серии методических экспериментов для сеточных диффузионно-конвективных уравнений.

Введение

Данная работа методологически направлена на синтез двух независимых идей из различных подходов к оптимизации итерационных методов для решения больших систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с разреженными матрицами, возникающими при сеточных аппроксимациях многомерных краевых задач математической физики. Первая из них заключается в построении обобщенных методов сопряженных градиентов с динамическими предобусловливателями (см. [1, 2] и цитируемые там работы). Здесь в подпространствах Крылова минимизируется некоторый функционал ошибки, причем на различных итерациях используются разные предобусловливающие матрицы, что бывает вынужденной мерой при построении многоуровневых итерационных процессов. Такие ситуации возникают при решении нелинейных систем (например, уравнений Навье — Стокса, описывающих течение вязкой несжимаемой жидкости) или в методах декомпозиции областей для сложных краевых задач (в том числе с целью распараллеливания алгоритмов), когда на каждом шаге «внешней» итерации промежуточные матрицы обращаются приближенно с помощью «внутреннего» итерационного алгоритма.

Второй исследуемый вопрос — оптимизация «собственного» итерационного параметра предобусловливающей матрицы, порождаемой явными или неявными методами переменных направлений (см., например, [3, 4]). Эта проблема относительно легко решается для стационарного итерационного процесса (см. [5–7] из публикаций недавних лет). Однако если внутренний параметр менять адаптивным образом на каждой итерации и применять ускорение сходимости с помощью алгоритмов градиентного (вариационного) типа в подпространствах Крылова, то исследование таких методов, рассматриваемых в работах [8–13], существенно усложняется, что иногда даже приводит к формулировке ошибочных утверждений (см., например, [10]).

Настоящая работа построена следующим образом. В § 1 мы описываем метод полусопряженных невязок с динамическими преобусловливателями, являющийся развитием предложенного в [14] алгоритма обобщенных сопряженных невязок (по поводу классического метода сопряженных невязок см. [15]).

*) Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 05–01–10487) и Отделения математических наук РАН (проект 1.3.7).

Для повышения устойчивости итерационного процесса к погрешностям округлений используется модифицированный метод Грама — Шмидта для ортогонализации направляющих векторов. Рассматривается также динамически предобусловленный метод полусопряженных градиентов, который является обобщением классического метода сопряженных градиентов. § 2 посвящен вопросам оптимизации выбора внутренних итерационных параметров предобусловливающих матриц. В § 3 приводятся и обсуждаются результаты численных экспериментов по применению предложенных методов к решению модельных СЛАУ, получаемых из конечно-объемных аппроксимаций трехмерной задачи Дирихле для диффузионно-конвективного уравнения.

§ 1. Динамически предобусловленные методы полусопряженных направлений

Рассмотрим СЛАУ

$$Au = f, \quad u = \{u_i\}, \quad f = \{f_i\} \in \mathbb{R}^N, \quad A \in \mathbb{R}^{N,N}, \tag{1}$$

с вещественной, квадратной, невырожденной и несимметричной, вообще говоря, матрицей A, которую будем предполагать положительно определенной в смысле выполнения условий

$$(Au, u) \geq \delta \|u\|^2, \quad \delta > 0, \quad (u, v) = (v, u) = \sum_{i=1}^{N} u_i v_i, \quad \|u\|^2 = (u, u),$$

для всех ненулевых векторов u. Как известно, эти неравенства обеспечивают положительную определенность симметричной части матрицы $A = \{a_{i,j}\}$:

$$(A^s u, u) \geq \delta(u, u), \quad A^s = (A + A^t)/2, \quad A^t = \{a_{j,i}\},$$

а также положительность вещественной части собственных чисел матрицы A. В отдельных, специально оговоренных случаях будем рассматривать также системы с симметричной положительно определенной (с. п. о.) матрицей A.

Для решения уравнений (1) применим итерационный процесс вида

$$\begin{gathered} r^0 = f - Au^0, \quad u^{n+1} = u^n + \alpha_n p^n, \\ r^{n+1} = r^n - \alpha_n A p^n = r^0 - \alpha_0 A p^0 - \cdots - \alpha_n A p^n, \ n = 0, 1, \ldots, \end{gathered} \tag{2}$$

где u^0, r^0 — векторы произвольного начального приближения и соответствующей невязки, а $p^0, p^1, \ldots$ суть какие-то направляющие линейно независимые векторы, конкретный способ вычисления которых будет определен позднее.

1.1. Метод полусопряженных невязок. В данном алгоритме направляющие векторы выбираются удовлетворяющими условиям ортогональности

$$(A^t A p^k, p^n) = (Ap^k, Ap^n) = \rho_n \delta_{k,n}, \quad \rho_n = (Ap^n, Ap^n), \ k, n = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{3}$$

Итерационные параметры α_n в (2) будем находить из требования минимальности евклидовой нормы вектора невязки $\|r^{n+1}\|$ в афинных подпространствах, сдвинутых на вектор u^0 относительно подпространств Крылова

$$\mathcal{K}_{n+1}(r^0, A) = \operatorname{span}\{p^0, p^1, \ldots, p^n\}. \tag{4}$$

В силу справедливых при условиях (3) соотношений

$$(r^{n+1}, r^{n+1}) = (r^0, r^0) - \sum_{k=0}^{n} \alpha_k [2(r^0, Ap^k) - \alpha_k (Ap^k, Ap^k)] \tag{5}$$

из условий минимума $\dfrac{\partial(r^{n+1}, r^{n+1})}{\partial \alpha_k = 0}$, $k = 0, 1, \ldots, n$, получаем формулу

$$\alpha_k = (r^0, Ap^k)/\rho_k, \quad \rho_k = (Ap^k, Ap^k). \tag{6}$$

Лемма 1. *Итерационный процесс* (2), (6) *для решения СЛАУ* (1) *с положительно определенной матрицей A при условиях* (3) *минимизирует норму невязки $\|r^{n+1}\|$ в сдвинутом на u^0 подпространстве Крылова* (4), *а векторы p^k, r^k при этом удовлетворяют условиям полусопряженности, т. е.*

$$(r^{n+1}, Ap^k) = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, n.$$

Последние соотношения при условиях (3), (6) проверяются непосредственно. □

Для данного семейства методов, как это следует из (5), (6), нормы невязок на разных итерациях удовлетворяют соотношениям

$$(r^{n+1}, r^{n+1}) = (r^0, r^0) - \sum_{k=0}^{n} \frac{(r^0, Ap^k)^2}{(Ap^k, Ap^k)} = (r^n, r^n) \left[1 - \frac{(r^0, Ap^n)^2}{(r^n, r^n)\rho_n}\right]. \tag{7}$$

Подчеркнем, что в описанном семействе алгоритмов направляющие векторы p^k, обладающие свойством A^tA-ортогональности, определены неоднозначно. Для их конкретизации используем формулы

$$p^0 = B_0^{-1} r^0, \quad p^{n+1} = B_{n+1}^{-1} r^{n+1} + \sum_{k=0}^{n} \beta_{n,k} p^k, \quad n = 0, 1, \ldots, \tag{8}$$

где $\beta_{n,k}$ — неопределенные пока числовые параметры, B_{n+1} — некоторые невырожденные предобусловливающие матрицы, определяемые из условий простой обратимости и неравенств

$$\operatorname{cond}\left(B_k^{-1} A\right) \ll \operatorname{cond}(A), \quad k = 0, 1, \ldots,$$

где $\operatorname{cond} A = \|A\| \|A^{-1}\|$ есть число обусловленности, соответствующее евклидовой (спектральной) матричной норме. Из (8) очевидным образом следует, что направляющие векторы p^{n+1} являются линейными комбинациями векторов $B_0^{-1} r^0, B_1^{-1} r^1, \ldots, B_{n+1}^{-1} r^{n+1}$, оболочку которых будем называть *предобусловленным пространством Крылова.*

Теорема 1. *Итерационный метод* (2), (3), (6), (8) *обеспечивает минимизацию нормы невязки $\|r^{n+1}\|$ при значениях коэффициентов*

$$\beta_{n,k} = -\left(Ap^k, AB_{n+1}^{-1} r^{n+1}\right) / (Ap^k, Ap^k), \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \quad k = 0, \ldots, n, \tag{9}$$

если матрица A невырождена, а матрицы AB_n^{-1} положительно определены. При этом норма $\|Ap^{n+1}\|$ достигает минимума в предобусловленном подпространстве Крылова, векторы невязок являются обобщенно полусопряженными в следующем смысле:

$$\left(AB_k^{-1} r^k, r^n\right) = \begin{cases} 0, & k < n, \\ \sigma_n = \left(AB_n^{-1} r^n, r^n\right), & k = n, \end{cases} \tag{10}$$

а для коэффициентов α_k в (2), (6) *справедлива формула*

$$\alpha_n = \left(AB_n^{-1} r^n, r^n\right) / (Ap^n, Ap^n). \tag{11}$$

Доказательство формулы (9) следует простым образом из подстановки представления (8) в условия ортогональности (3). Справедливость свойств (10) показывается при $k < n$ с помощью соотношений

$$\begin{aligned} \left(AB_k^{-1} r^k, r^n\right) &= \left(\left(Ap^k - \sum_{i=0}^{k-1} \beta_{k,i} Ap^i\right), \left(r^0 - \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i Ap^i\right)\right) \\ &= (Ap^k, r^0) = \alpha_k (Ap^k, Ap^k) - \sum_{i=0} \beta_{k,i} [(Ap^i, r^0) - \alpha_i (Ap^i, Ap^i)] = 0. \end{aligned} \tag{12}$$

Для $k = n$ из таких же выражений имеем

$$\left(AB_n^{-1}r^n, r^n\right) = (Ap^n, r^0), \tag{13}$$

для коэффициентов α_k получаем новое представление (11). $\square$

Отметим, что в частном случае $B_k \equiv I$ (единичная матрица) векторы невязок со свойствами (10) называются правыми A-полусопряженными (см. [16, 17]); в работе [14] соответствующий метод обозначается аббревиатурой GCR (Generalized Conjugate Residual).

Рассмотренный в теореме 1 алгоритм с меняющимися от итерации к итерации предобусловливающими матрицами B_k будем называть *методом полусопряженных невязок с динамическим предобусловливанием* (SCR-DP, Dynamic Preconditioned). Следует заметить, что его реализация требует на каждой итерации выполнения по одному векторно-матричному умножению на A и B_{n+1}^{-1} в силу следующего из (8) соотношения

$$Ap^{n+1} = AB_{n+1}^{-1}r^{n+1} + \sum_{k=0}^{n} \beta_{n,k}Ap^k.$$

Как нетрудно видеть из (5)–(7) и (13), в методе SCR-DP изменение нормы невязки на итерациях происходит в соответствии с равенством

$$(r^{n+1}, r^{n+1}) = (r^n, r^n)q^n, \quad q^n = 1 - \frac{(AB_n^{-1}r^n, r^n)^2}{(r^n, r^n)(Ap^n, Ap^n)}, \tag{14}$$

которое можно также переписать в виде

$$(r^{n+1}, r^{n+1}) = (r^0, r^0) - \frac{(AB_0^{-1}r^0, r^0)^2}{\rho_0(r^0, r^0)} - \dots - \frac{(AB_n^{-1}r^n, r^n)^2}{\rho_n(r^n, r^n)}.$$

Отсюда очевидным образом следует, что достаточным условием сходимости метода SCR-DP, т. е. стремления невязки к нулю, является невырожденность матриц A и AB_n^{-1}.

Утверждение 1. *Если $B_k \equiv I$ и A есть с. п. о.-матрица, то рассмотренный алгоритм переходит в метод сопряженных невязок, обладающий следующими свойствами* (см. [1, 3, 15]):

а) *векторы невязок r^k являются A-ортогональными, т. е.*

$$(Ar^k, r^n) = \sigma_n\delta_{k,n}, \quad \sigma_n = (Ar^n, r^n), \quad k, n = 0, 1, \dots;$$

б) *в рекуррентной формуле* (8) *для вычисления направляющих векторов под знаком суммы остается только один член* ($\beta_{n,k} = 0$ *при* $k < n$);

в) *для уменьшения нормы невязки в* $\varepsilon < 1$ *раз*

$$\|r^n\|/\|r^0\| \leq \varepsilon < 1 \tag{15}$$

необходимое число итераций оценивается как

$$n(\varepsilon) \leq \left(\ln \frac{1 + \sqrt{1 - \varepsilon^2}}{\varepsilon}\right) \Big/ \ln \gamma + 1, \qquad \gamma = (\sqrt{\varkappa} - 1)/(1 + \sqrt{\varkappa}), \quad \varkappa = \mathrm{cond}(A). \tag{16}$$

Другие возможные оценки скорости сходимости такого итерационного процесса рассматривались в работах [18, 19].

Утверждение 2. *Пусть $B_k = B$, A есть невырожденная матрица, AB^{-1} – положительно определенная диагонализируемая матрица, т. е. представимая в виде $AB^{-1} = X\Lambda X^{-1}$, где $\Lambda = \mathrm{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ есть диагональная матрица, λ_k — собственные числа матрицы AB^{-1}, а X — квадратная матрица, столбцы которой суть собственные векторы AB^{-1}. Тогда число итераций $n(\varepsilon)$, необходимое для выполнения условия (16), оценивается величиной*

$$n(\varepsilon) \le \frac{|\ln(\varepsilon/\,\mathrm{cond}(X))|}{|\ln(\gamma_1/\gamma_2)|}, \quad \gamma_1 = a + \sqrt{a^2 - d^2}, \quad \gamma_2 = c + \sqrt{c^2 - d^2}.$$

Здесь a, c, d — соответственно величина главной полуоси, координата центра и фокусное расстояние ($d^2 < c^2$) эллипса, не включающего нулевую точку и содержащего в себе весь спектр матрицы AB^{-1} в комплексной плоскости.

Отметим, что данный метод полусопряженных невязок с постоянной предобусловливающей матрицей B эквивалентен по скорости сходимости алгоритму GMRES [15] с таким же предобусловливанием, поскольку для них обоих вектор невязки представим в виде $r^n = P_n(AB^{-1})r^0$ и минимизируется в предобусловленном подпространстве Крылова, где $P_n(\lambda)$ — нормированный условием $P_n(0) = 1$ полином n-го порядка.

Реализация формулы (8) последовательно для $n = 0, 1, \dots$ с алгебраической точки зрения представляет собой преобразование линейно независимых векторов $B_0^{-1}r^0, \dots, B_n^{-1}r^n$ в обладающие свойством A^tA-ортогональности (3) векторы $p^0, p^1, \dots, p^n$ с помощью процесса Грама — Шмидта.

Как известно (см., например, [20]), эта вычислительная процедура при больших n может проявлять свойства неустойчивости к погрешностям округлений, и по этой причине рекомендуется использовать модифицированный метод ортогонализации Грама — Шмидта, который в данном случае приводит к следующему алгоритму.

Для вычисления $\beta_{n,k}$ вместо (9) предлагается формула

$$\beta_{n,k} = -\big(Ap^k, AB_n^{-1}r^{n,k}\big)/\rho_k, \quad k = 0, 1, \dots, n, \tag{18}$$

в которой вектор $r^{n,k}$ определяется из соотношения

$$\begin{gathered} r^{n,k} = B_{n+1}^{-1}r^{n+1} + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_{n,i}p^i = r^{n,k-1} + \beta_{n,k-1}p^{k-1}, \\ r^{n,n} = p^{n+1}, \quad r^{n,0} = B_{n+1}^{-1}r^{n+1}, \end{gathered} \tag{19}$$

а коэффициенты $\beta_{n,i}$ находятся из условий минимальности нормы вектора $r^{n,k}$, т. е.

$$\frac{\partial \|r^{n,k}\|}{\partial \beta_{n,i}} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, k-1,$$

и оказываются равными

$$\beta_{n,i} = -\big(Ap^i, AB_n^{-1}r^{n,k}\big)/\rho_i.$$

Легко видеть, что значения $\beta_{n,k}$, вычисляемые по формулам (9) и (18), при точном выполнении арифметических операций совпадают, так как

$$\big(Ap^k, AB_{n+1}^{-1}r^{n+1}\big) = \big(Ap^k, AB_{n+1}^{-1}r^{n,k}\big)$$

в силу условий (3). Многочисленные публикации подтверждают, что именно условия минимальности $\|r^{n,k}\|$ обеспечивают повышенную точность модифицированного метода ортогонализации в условиях машинных округлений.

Реализация данного алгоритма не требует дополнительных матрично-векторных операций, так как вычисление участвующих в (18) векторов может быть выполнено с помощью следующей из (19) рекуррентной формулы

$$Ar^{n,k} = Ar^{n,k-1} + \beta_{n,k-1}Ap^{k-1}. \tag{20}$$

Поскольку все коэффициенты $\beta_{n,k}$ из рекуррентной формулы (8) в общем случае являются ненулевыми, главным недостатком метода SCR-DP является необходимость запоминания слишком большого количества векторов (для больших N они представляются в программах вещественными массивами с двойной точностью): $u^n, r^n, Ar^n, p^0, p^1, \dots, p^{n-1}, Ap^0, Ap^1, \dots, Ap^{n-1}$. Хранения векторов $Ap^0, Ap^1, \dots, Ap^{n-1}$, вообще говоря, можно избежать, что дает существенную экономию оперативной памяти, но при этом на каждой итерации придется выполнять дополнительное матрично-векторное умножение для вычисления вектора Ap^k.

По этой причине будем рассматривать две упрощенные (редуцированные) модификации данного алгоритма с ограниченным использованием памяти. Первая из них, обозначаемая SCR-DPmR (m — целое число), предполагает рестарт через каждые m итераций, т. е. для $n_l = ml$ невязка вычисляется по исходному уравнению ($r^{n_l} = f - Au^{n_l}$), а далее последовательные приближения определяются, как в начале процесса. Во втором методе (SCR-DPmT) применяется искусственное ограничение ортогонализации, т. е. при $n > m$ сохраняются только m последних векторов $p^n, \dots, p^{n-m+1}$ и $Ap^n, \dots, Ap^{n-m+1}$, а направляющие векторы находятся по формуле

$$p^{n+1} = B_{n+1}^{-1} r^{n+1} + \sum_{k=n-m+1}^{n} \beta_{n,k} p^k. \tag{21}$$

Сходимость таких итерационных процессов (без динамического предобусловливания) исследована в [14].

В качестве формального обобщения рассмотренных двух подходов может быть предложен следующий алгоритм, сочетающий приемы рестартов и ограниченной ортогональности.

Алгоритм SCR-DP(m_1, m_2). Векторы итерационных приближений u^n и невязок определяются по формулам (2), (11), а направляющие векторы p^n вычисляются по аналогичной (21) формуле

$$p^{n+1} = B_{n+1}^{-1} r^{n+1} + \sum_{k=n-m+1}^{n} \beta_{n,k} p^k, \quad m = \min\{n', m_1\}, \tag{22}$$

где коэффициенты $\beta_{n,k}$ определяются из (18), (19), $n' = n - \left[\dfrac{n}{m_2}\right] m_2$ ($[b]$ есть целая часть b), m_1 означает количество сохраняемых последних (A^tA-ортогональных) векторов p^k, а m_2 — период проведения рестартов, т. е. при $n = n_l \equiv m_2 l$, $l = 0, 1, \dots$, невязка и корректирующий вектор определяются не по рекуррентным соотношениям (2), а из исходного уравнения (1) по формуле $r^{n_l} = f - Au^{n_l} = p^{n_l}$.

Аналогичные варианты алгоритмов с экономией оперативной памяти компьютеров используются в обобщенных методах минимальных невязок (см. GMRES в [15]). Поскольку в таких случаях оптимизация итерационного процесса осуществляется в m-мерных подпространствах Крылова, то очевидным образом с уменьшением m скорость сходимости итераций падает. В предельном случае $m = 0$ все $\beta_{n,k}$ формально можно считать нулевыми, и данный алгоритм переходит в одношаговый (предобусловленный) метод минимальных невязок. В отличие от редуцированных алгоритмов, основанных на формуле (22) с $m < n+1$, метод с хранением и использованием $m = n+1$ направляющих векторов будем называть *полным методом полусопряженных невязок*.

В редуцированных алгоритмах естественным образом меняется формула изменения нормы невязки при $n > m$:

$$(r^{n+1}, r^{n+1}) = (r^k, r^k) - \frac{(AB_k^{-1}r^k, r^k)}{\rho_k(r^k, r^k)} - \cdots - \frac{(AB_n^{-1}r^n, r^n)}{\rho_n(r^n, r^n)},$$

справедливая только при $k \geq n + 1 - m$.

1.2. Метод полусопряженных градиентов. Данный алгоритм определяется следующим образом. Векторы последовательных приближений u^{n+1} и невязок r^{n+1} вычисляются по формулам (2), как и в предыдущем случае. Однако коэффициенты α_n теперь находятся из условий левой полусопряженности направляющих векторов p^n [17]:

$$(Ap^n, p^k) = 0 \quad \text{для} \quad k = 0, 1, \ldots, n-1, \tag{23}$$

а также из требования ортогональности вектора невязки r^n всем предыдущим направляющим векторам, т. е.

$$(r^n, p^k) = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1. \tag{24}$$

В этом случае коэффициенты α_n из (2) имеют вид

$$\alpha_n = (r^0, p^n)/(Ap^n, p^n) = (r^n, p^n)/(Ap^n, p^n). \tag{25}$$

Соответствующие направляющие векторы p^n находятся из аналогичных (8) «длинных» рекурсий:

$$\begin{gathered} p^0 = B_0^{-1}r^0, \quad p^{n+1} = B_{n+1}^{-1}r^{n+1} + \sum_{j=0}^{n} \beta_{n,j}p^j = p^{n+1,k} + \sum_{j=k}^{n}\beta_{n,j}p^j, \\ k = 0, 1, \ldots, n, \\ p^{n+1,0} = B_{n+1}^{-1}r^{n+1}, \quad p^{n+1,k} = p^{n+1,k-1} + \beta_{n,k-1}p^{k-1}, \quad p^{n+1} = p^{n+1,n+1}. \end{gathered} \tag{26}$$

Из условий полуортогональности (23) формулы для коэффициентов $\beta_{n,j}$ принимают вид

$$\beta_{n,j} = -(p^j, Ap^{n,j})/(p^j, Ap^j), \quad j = 0, 1, \ldots, n. \tag{27}$$

При этом для коэффициентов α_n в дополнение к (25) с помощью легко проверяемого соотношения $(p^n, r^n) = \big(B_n^{-1}r^n, r^n\big)$ выводится новое, более предпочтительное с вычислительной точки зрения выражение

$$\alpha_n = \big(B_n^{-1}r^n, r^n\big)/(p^n, Ap^n). \tag{28}$$

Из него, в частности, следует, что при положительной определенности матриц B_n и A коэффициенты α_n положительны.

Векторы невязок в данном методе, как легко проверить, обладают следующим свойством ортогональности:

$$\big(r^n, B_k^{-1}r^k\big) = \big(r^n, B_n^{-1}r^n\big)\delta_{n,k}, \quad k = 0, 1, \ldots, n. \tag{29}$$

К сожалению, в общем случае рассматриваемый итерационный алгоритм в предобусловленных подпространствах Крылова не обладает вариационным свойством минимизации (или просто монотонного уменьшения) функционала ошибки, т. е. для него справедливо равенство

$$(A^{-1}r^n, r^n) = (A^{-1}r^0, r^0) - \alpha_0(A^{-t}Ap^0, p^0) - \dots - \alpha_{n-1}(A^{-t}Ap^{n-1}, r^{n-1}), \quad (30)$$

в котором используется обозначение $A^{-t} = (A^t)^{-1} = (A^{-1})^t$.

Однако отсюда с помощью (26) легко видеть, что если матрица СЛАУ (1) симметрична ($A^{-t}A = I$), то даже при несимметричности невырожденных предобусловливающих матриц B_n функционал ошибки для положительно определенной исходной матрицы A монотонно убывает:

$$(A^{-1}r^{n+1}, r^{n+1}) = (A^{-1}r^0, r^0) - \frac{(B_0^{-1}r^0, r^0)^2}{(Ap^0, p^0)} - \dots - \frac{(B_n^{-1}r^n, r^n)^2}{(Ap^n, p^n)}. \quad (31)$$

Если же при этом $B_n \equiv I$, т. е. предобусловливание фактически не используется, то данный алгоритм переходит в классический метод сопряженных градиентов, в частности, в формулах (26) все коэффициенты $\beta_{n,j}$, кроме $\beta_{n,n}$, обращаются в нуль. В силу такого формального соответствия, алгоритм (2), (25)–(27) будем называть *динамически предобусловленным методом полусопряженных градиентов* и обозначать SCG-DP. Отметим, что из соотношений (30), (31) следует его сходимость только в случае симметричности СЛАУ, и при этом необходимы невырожденность предобусловливающих матриц B_n и положительная определенность матрицы A.

В целях экономии памяти методы полусопряженных градиентов могут также использоваться в редуцированных вариантах как с применением рестартов, так и с ограниченной ортогонализацией. В этих случаях естественным образом меняется формула (30) для функционала ошибки:

$$(A^{-1}r^{n+1}, r^{n+1}) = (A^{-1}r^k, r^k) - \alpha_k(A^{-t}Ap^k, r^k) - \dots - \alpha_n(A^{-t}Ap^n, r^n),$$

справедливая при $k \geq n + 1 - m$.

§ 2. Оптимизация параметрических предобусловливателей

Рассмотрим параметрический предобусловливатель, соответствующий итерационным явным методом неполной факторизации [3, 4], который в различных частных случаях переходит в алгоритмы, известные в литературе под разными названиями: попеременно-треугольный метод (см. [10, 11] и цитируемые там работы), симметричная последовательная верхняя релаксация (SSOR, Symmetric Successive Over Relaxation [1]) и модифицированное неполное LU-разложение (MILU, Modified Incomplete LU-Decomposion [15]). Если матрицу исходной СЛАУ представить в виде $A = D - L - U$, где D, L и U — диагональная, строгие нижняя и верхняя треугольные матрицы, то соответствующий предобусловливатель записывается в форме

$$\begin{gathered} B_n = (G_n - L)G_n^{-1}(G_n - U), \quad G_n = \frac{1}{\omega_n}D - \theta_n S_n, \\ Se = \left(\frac{1-\omega_n}{\omega_n}D + LG_n^{-1}U\right)e. \end{gathered} \quad (32)$$

Здесь ω_n и θ_n — релаксирующий и компенсирующий итерационные параметры, e — вектор с единичными компонентами, а G_n и S_n суть диагональные матрицы, которые определяются из условия согласования строчных сумм при $\theta_n = 1$, т. е. $Ae = B_ne$.

Как следует из (14), в методе SCR-DP оптимизация параметров ω_n, θ_n на каждой итерации при заданных векторах r^n, p^n может быть сформулирована как решение задачи минимизации функционала q^n, т. е.

$$\omega_n, \theta_n = \arg\{\max_{\omega,\theta}(AB^{-1}(\omega,\theta)r^n, r^n)^2\}. \tag{33}$$

Задача (33) может приближенно решаться, в принципе, каким-либо численным методом оптимизации, однако это неизбежно приведет к усложнению реализации отдельной итерации метода SCR-DP. Для облегчения проблемы рассмотрим частный случай с $\theta_n = 0$, когда оптимизация по второму параметру может быть проведена с помощью дифференцирования матрицы, обратной к предобусловливающей:

$$\frac{\partial B^{-1}}{\partial\omega} = -B^{-1}\frac{\partial B}{\partial\omega}B^{-1}, \quad \frac{\partial B}{\partial\omega} = LD^{-1}U - \frac{1}{\omega^2}D. \tag{34}$$

Отсюда из условия (33), которое в данном случае сводится к равенству $(AB^{-1}r^n, r^n)'_\omega = 0$, для ω_n получаем нелинейное уравнение

$$\omega_n = \left[\frac{(AB_n^{-1}DB_n^{-1}r^n, r^n)}{(AB_n^{-1}LD^{-1}UB_n^{-1}r^n, r^n)}\right]^{1/2}. \tag{35}$$

Очевидно, что рассматриваемая постановка задачи оптимизации итерационных параметров имеет локальный характер, т. е. минимизация нормы невязки $\|r^{n+1}\|$ на одном шаге производится при фиксированных предыдущих приближениях u^n, r^n, p^n. Более общая формулировка, как это следует из (7), (13), требует минимизации функционала

$$(r^{n+1}, r^{n+1}) = (r^0, r^0) - \frac{(AB_0^{-1}r^0, r^0)^2}{(Ap^0, Ap^0)} - \cdots - \frac{(AB_n^{-1}r^n, r^n)^2}{(Ap^n, Ap^n)}$$

по совокупности параметров $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_n$, что представляется слишком трудоемкой вычислительной проблемой, поскольку векторы p^n, например, зависят от всех этих величин.

Для решения нелинейного уравнения (34) можно применить итерационный метод Пикара с релаксационным параметром $0 < \mu < 2$:

$$\begin{gathered}\widehat{\omega}_n^{s+1} = \left[\frac{(AB_{n,s}^{-1}DB_{n,s}^{-1}r^n, r^n)}{(AB_{n,s}^{-1}LD^{-1}UB_{n,s}^{-1}r^n, r^n)}\right]^{1/2}, \quad B_{n,s} = B(\omega_n^s), \\ \omega_n^{s+1} = \widehat{\omega}_n^{s+1} + \mu(\widehat{\omega}_n^{s+1} - \omega_n^s), \quad \omega_n^0 = 1, \quad s = 0, 1, \ldots .\end{gathered} \tag{36}$$

Обоснование сходимости данного итерационного процесса и даже просто положительности участвующих в (36) скалярных произведений требует специальных исследований с дополнительными предположениями о свойствах участвующих здесь матриц.

В силу этого рассмотрим упрощенный эмпирический подход к выбору релаксационного параметра ω_n при $\theta_n \equiv 0$ в предобусловливающей матрице, которую приведем к виду

$$\bar{B}_n = \omega_n(\omega_n^{-1}I - \bar{L})(\omega_n^{-1}I - \bar{U}), \tag{37}$$

получаемому после предварительного масштабирования системы (1):

$$\begin{gathered}\bar{A}\bar{u} = \bar{f} \equiv D^{-1/2}f, \quad \bar{u} = D^{1/2}u, \quad \bar{B}_n = D^{-1/2}B_nD^{-1/2}, \\ \bar{A} = I - \bar{L} - \bar{U}, \quad \bar{L} = D^{-1/2}LD^{-1/2}, \quad \bar{U} = D^{-1/2}UD^{-1/2}.\end{gathered} \tag{38}$$

Если в качестве «близости» матриц $\bar{B}_n$ и $\bar{A}$ выбрать равенство

$$(\bar{B}_n v^n, v^n) = (\bar{A}\bar{v}^n, \bar{v}^n) \tag{39}$$

для некоторого ненулевого вектора v^n, то для итерационного параметра ω_n получаем формулу

$$\omega_n = \frac{[(v^n, v^n) - \sqrt{(v^n, v^n)^2 - 4(\bar{L}\bar{U}v^n, v^n)(v^n, v^n)}\,]}{2(\bar{L}\bar{U}v^n, v^n)}. \tag{40}$$

Очевидно, что для вычислимости ω_n здесь должно выполняться условие

$$4(\bar{L}\bar{U}v^n, v^n)/(v^n, v^n) \le 1. \tag{41}$$

В качестве таких пробных векторов мы рассмотрим вектор невязки r^n, когда по условию

$$(\bar{B}_n(\omega_n) r^n, r^n) = (\bar{A}r^n, r^n) \tag{42}$$

параметр ω_n определяется формулой (40) при $v^n = r^n$, а также используется вектор $v^n \equiv e$ с единичными компонентами. В последнем случае фактически будем иметь статическое предобусловливание, которое в последующих экспериментах будет использоваться для анализа эффекта динамического предобусловливания.

§ 3. Примеры численных экспериментов

Проиллюстрируем скорость сходимости рассмотренных алгоритмов полусопряженных невязок и полусопряженных градиентов в применении к решению несимметричных систем сеточных семиточечных уравнений, аппроксимирующих задачу Дирихле для линейного диффузионно-конвективного уравнения

$$\begin{gathered}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + p\frac{\partial u}{\partial x} + q\frac{\partial u}{\partial y} + r\frac{\partial u}{\partial z} = f(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \Omega,\\ u|_\Gamma = g(x, y, z),\end{gathered} \tag{43}$$

в единичном кубе $\Omega = [0, 1]^3$ на различных кубических сетках с шагами $h = 1/(N + 1)$. Дискретизация задачи проводилась с помощью монотонной схемы экспоненциального типа [21]. Функции f и g в (43) 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 (16) полагалась равной $\varepsilon = 10^{-7}$. Все вычисления проводились с двойной точностью.

В таблицах ниже каждая клетка содержит количества итераций для трех различных значений конвективных коэффициентов: $p = q = r = 0, 4, 16$ (сверху вниз соответственно). При этом в случае нулевых конвективных коэффициентов фактически реализовывались короткие рекурсии для направляющих векторов p^n (коэффициенты $\beta_{n,j}$ отличны от нуля только при $j = n$), что соответствует классическим методам сопряженных невязок и сопряженных градиентов.

Во всех экспериментах методы SCR и SCG применялись в вариантах с проведением рестартов через заданное количество итераций $m = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ с хранением и использованием всех ортогональных направляющих векторов p^n. Расчеты проводились на сетках с общим числом узлов $N^3 = 7^3, 15^3, 31^3, 63^3$.

В табл. 1 приводятся для последующего сравнения результаты для метода SCR со статическим предобусловливанием соответственно при $\omega_n \equiv 1$ и при выборе постоянного параметра ω из условия $v^n = e$ в формуле (40).

Табл. 2 содержит результаты экспериментов для динамически предобусловленного метода полусопряженных невязок с выбором ω_n из уравнения (40) при $v^n = r_n$, а также демонстрирует эффект локальной минимизации нормы вектора невязки по условию

$$\omega_n = \arg\{\min_{\omega}(r^n, r^n)\}, \tag{44}$$

причем величина параметра ω_n определялась на каждой итерации численно с точностью до 0,01.

Таблица 1

Результаты расчетов методом SCR

N	$\omega_n = 1$						$\omega_n = \omega_0$, $(Ae, e) = (B(\omega_0)e, e)$					
	m						m					
	1	2	4	8	16	32	1	2	4	8	16	32
7	25 22 9	18 15 9	14 15 9	11 11 8	11 11 8	11 11 8	15 13 6	12 10 6	10 10 6	10 9 6	10 9 6	10 9 6
15	79 70 23	48 41 23	30 28 25	24 28 25	20 23 16	20 20 16	17 24 12	22 19 11	18 15 10	16 16 10	14 14 10	14 14 10
31	268 246 27	147 125 23	87 74 24	55 51 24	43 52 20	36 42 20	31 38 26	41 37 19	31 26 19	21 25 19	21 21 19	21 20 16
63	938 887 309	444 409 160	256 212 90	161 132 99	100 99 121	81 107 128	48 73 59	71 68 32	53 44 34	40 43 33	35 40 32	31 31 26

Таблица 2

Результаты расчетов методом SCR-DP

N	$(Ar^n, r^n) = (B(\omega_n)r^n, r^n)$						$\omega_n = \arg\{\min_{\omega}(r^n, r^n)\}$					
	m						m					
	1	2	4	8	16	32	1	2	4	8	16	32
7	14 14 7	13 10 7	11 10 7	10 10 6	10 9 6	10 9 6	13 13 6	11 11 6	10 10 6	10 10 6	10 10 6	10 10 6
15	30 23 15	25 20 13	20 18 13	18 18 12	15 15 11	15 15 11	18 17 11	18 16 10	16 14 10	15 14 9	14 13 9	14 13 9
31	61 43 27	46 43 23	34 31 24	31 28 24	27 29 20	24 24 20	27 27 18	29 24 16	25 21 15	20 20 15	20 20 14	19 19 14
63	149 82 51	80 67 42	67 56 42	52 53 45	42 52 46	39 42 36	54 46 38	55 42 29	43 32 26	36 29 25	32 30 25	28 27 23

В табл. 3, 4 приводятся результаты расчетов по методу полусопряженных градиентов, аналогичные данным табл. 1, 2: для $\omega_n \equiv 1$, статического предобусловливания по условию (40) при $v^n = e$, для выбора параметра ω_n из уравнения (40) при $v^n = r_n$ и уравнения (44).

Таблица 3

Результаты расчетов методом SCG

N	$\omega_n \equiv 1$						$\omega = \omega_0,\ (Ae, e) = (B(\omega_0)e, e)$					
	m						m					
	1	2	4	8	16	32	1	2	4	8	16	32
7	27 23 9	19 15 9	15 16 9	11 11 8	11 11 8	11 11 8	16 11 6	12 11 6	11 10 6	10 9 6	10 9 6	10 9 6
15	87 73 24	49 43 26	33 28 28	29 33 25	20 25 16	20 20 16	34 20 12	23 19 12	17 16 11	16 16 10	14 14 10	14 14 10
31	305 259 85	161 137 47	93 78 45	61 53 57	53 64 65	37 42 33	78 36 18	45 39 20	31 27 20	27 28 19	21 21 16	21 21 16
63	1095 945 319	555 475 165	301 261 99	175 153 83	117 104 111	93 125 158	192 74 36	99 83 33	63 55 36	49 40 45	39 41 33	32 32 27

Таблица 4

Результаты расчетов методом SCR-DP

N	$(Ar^n, r^n) = (B(\omega_n)r^n, r^n)$						$\omega_n = \arg\{\min\limits_{\omega}(r^n, r^n)\}$					
	m						m					
	1	2	4	8	16	32	1	2	4	8	16	32
7	19 11 8	16 11 8	13 10 8	10 9 7	10 9 7	10 9 7	14 12 6	11 10 6	10 9 6	9 9 6	9 9 6	9 9 6
15	35 27 21	43 31 23	29 23 21	22 24 16	17 18 13	17 17 13	23 15 10	18 15 10	16 13 10	14 13 10	14 13 10	14 13 10
31	59 81 43	61 56 47	73 63 45	53 47 56	41 43 41	32 33 28	262 31 17	37 25 15	29 21 15	25 20 15	20 19 14	19 18 14
63	125 125 102	128 140 99	157 132 87	130 113 81	95 82 93	78 96 96	900 159 29	269 85 23	56 33 23	47 37 23	37 33 22	30 31 22

На основе рассмотренных данных можно сделать следующие выводы.

1. Методы полусопряженных невязок и полусопряженных градиентов при различных порядках СЛАУ, параметрах рестартов m и величинах конвективных коэффициентов ведут себя примерно одинаковым образом, причем в целом по количеству итераций наблюдается преимущество SCR перед SCG процентов на 10–20, иногда их различие практически нивелируется, а иногда достигает 100 и более процентов.

2. Экономичный динамический выбор параметров ω_n по условию (42) демонстрирует достаточно высокую эффективность: по количеству итераций он значительно превосходит случай $\omega_n \equiv 1$ и ненамного уступает алгоритму с локальной минимизацией нормы невязки по формуле (43). Отметим, что последний представляет чисто теоретический интерес, поскольку нахождение оптимальных значений ω_n в данном случае приводит к слишком трудоемкой реализации каждой итерации.

3. Статическое предобусловливание с выбором релаксационного параметра $\omega_n = \omega_0$ по условию $(\bar{B}(\omega_0)e, e) = (\bar{A}e, e)$ обнаруживает неожиданно высокие результаты практически во всех случаях: для методов SCR и SCG, разных параметров рестартов m и различных порядков СЛАУ.

4. Скорость сходимости итераций в проведенных экспериментах достаточно хорошо соответствует теоретическим оценкам там, где это возможно: для симметричных СЛАУ с нулевыми конвективными коэффициентами число итераций для $\omega_n \equiv 1$ примерно пропорционально h^{-2} при $m = 1$ и h^{-1} при $m = 32$, для остальных адаптивных параметрах эти величины близки к $O(h^{-1})$ и $O(h^{-1/2})$ соответственно.

5. С ростом параметров рестарта m количество итераций $n(\varepsilon)$ в основном уменьшается, за отдельными исключениями, и эта тенденция имеет место для различных конвективных коэффициентов. При их увеличении числа $n(\varepsilon)$, как правило, убывают, что, по-видимому, объясняется хорошими качествами используемого предобусловливателя.

В заключение следует сказать, что приведенные результаты являются предварительными и проблема оптимизации динамических предобусловливателей остается открытой. Это в первую очередь касается построения экономичного алгоритма вычисления «внутреннего» итерационного параметра ω_n, обеспечивающего хотя бы приближенную глобальную минимизацию нормы вектора невязки в подпространствах Крылова.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Axelsson O.* Iterative Solution Methods. Cambridge: Univ. Press, 1994.

2. *Szyld D. B., Vogel J. A.* FQMR: a flexible quasi-minimal residual method with inexact preconditioning // SIAM J. Sci. Comput. 2001. V. 23, N 2. P. 363–380.

3. *Ильин В. П.* Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Наука, 1995.

4. *Марчук Г. И.* Методы расщепления и переменных направлений. М.: ОВМ АН СССР, 1986.

5. *Miellou J. C., Spiteri P.* Optimization of relaxation parameter for SSOR and ADI preconditioning // Numer. Algorithms. 2002. V. 29. P. 153–195.

6. *Spiteri P., Miellou J. C., Bahi J. M.* Evaluation of parameters for the optimization of SSOR and ADI preconditioning // Numer. Algorithms. 2002. V. 29. P. 249–265.

7. *Miellou J. C., Spiteri P., Evans D. J.* Preconditionnement SSOR: Optimisation du conditionnement obtenuen fonction du parametre de relaxation // Internat. J. Comput. Math. 1992. V. 41. P. 189–200.

8. *Годунов С. К., Прокопов Г. П.* О решении разностного уравнения Лапласа // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1969. Т. 9, № 2. С. 462–468.

9. *Горбенко Н. И., Ильин В. П.* О градиентных методах переменных направлений // Некоторые проблемы вычислительной и прикладной математики. Новосибирск: Наука, 1975. С. 207–213.

10. *Коновалов А. Н.* Вариационная оптимизация итерационных методов расщепления // Сиб. мат. журн. 1997. Т. 38, № 2. С. 312–325.
11. *Коновалов А. Н.* Метод скорейшего спуска с адаптивным попеременно-треугольным переобуславливателем // Дифференц. уравнения. 2004. Т. 40, No 7. С. 953–963.
12. *Коновалов А. Н.* Адаптивный метод верхней релаксации // Дифференц. уравнения. 2006. Т. 42, № 7. С. 943–950.
13. *Моцартова А. С.* Итерационный метод скорейшего спуска с адаптивным попеременно-треугольным переобуславливателем // Тр. конф. молодых ученых. Новосибирск: изд. ИВМиМГ, 2006. С. 152–159.
14. *Eisenstat S. C., Elman H. C., Schultz M. H.* Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations // SIAM J. Numer. Anal. 1983. V. 20, N 3. P. 345–357.
15. *Saad Y.* Iterative Methods for Sparse Linear Systems. N. Y.: PWS Publ., 1996.
16. *Stewart G. W.* Conjugate direction methods for solving systems of linear equations // Numer. Math. 1973. V. 21. P. 285–297.
17. *Yuan J. Y., Golub G. H., Plemmons R. J., Cecilio W. A. G.* Semi-conjugate direction methods for real positive definite systems // BIT. 2004. V. 44, N 1. P. 189–207.
18. *Sadok H.* Analysis of the convergence of the minimal and the orthogonal residual methods // Numer. Algorithms. 2005. V. 40. P. 201–216.
19. *Kaporin I.* Superlinear convergence in minimum residual iterations // Numer. Linear Algebra Appl. 2005. V. 12. P. 1–18.
20. *Ильин В. П.* Численный анализ. Ч. 1. Новосибирск: изд. ИВМиМГ СО РАН, 2004.
21. *Andreeva M. Yu., Il'in V. P., Itskovich E. A.* Two solvers for nonsymmetric SLAE // Bull. Novosibirsk Comput. Center. Ser. Numer. Anal. 2004. N 12. P. 1–16.

Статья поступила 9 августа 2007 г.

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