

УДК 519.632

МЕТОДЫ БИСОПРЯЖЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА*)

В. П. Ильин

Рассматриваются ортогональные и вариационные свойства семейства итерационных алгоритмов в подпространствах Крылова для решения СЛАУ с разреженными несимметричными матрицами. Предложены и исследованы методы бисопряженных невязок, вдвоенных бисопряженных невязок и стабилизированных сопряженных невязок. Приводятся результаты численных экспериментов для серии методических задач.

Ключевые слова: методы бисопряженных направлений, вдвоенные и стабилизированные методы бисопряженных направлений, ортогональные свойства, несимметричные СЛАУ, предобуславливание.

Введение. Для итерационного решения очень больших разреженных СЛАУ с несимметричными матрицами существует три основных группы методов в подпространствах Крылова (см. [1–6]). Первая из них основана на левой или правой трансформации Гаусса исходной системы и последующего применения какого-либо алгоритма сопряженных направлений для решения получаемой симметричной СЛАУ. Принципиальный недостаток такого подхода заключается в сильном увеличении числа обусловленности получаемых симметризованных матриц AA^t или A^tA , где индекс t означает операцию транспонирования. Отметим, что к этому же классу относятся проекционные методы, в которые входят алгоритмы типа Качмажа и Чиммино (см. [7, 8] и цитируемую там литературу).

Вторая группа использует обобщенные методы сопряженных направлений, которые порождают полусопряженные векторы, вычисляемые с помощью «длинных» рекуррентных соотношений. Примерами могут здесь служить популярный алгоритм GMRES или методы полусопряженных направлений в различных модификациях [9–12]. Такие методы имеют существенное ограничение, поскольку при большом числе итераций n требуется слишком большой объем оперативной памяти ЭВМ для хранения всех вспомогательных векторов. Во избежание этого формируются редуцированные варианты этих алгоритмов, использующие периодические рестарты и/или ограниченную ортогонализацию корректирующих векторов. Однако при этом понижается размерность подпространств Крылова, что приводит к ухудшению сходимости итерационных процессов.

Третья стратегия итерационного решения несимметричных СЛАУ предполагает построение последовательности биортогональных векторов, которые вычисляются с помощью коротких двухчленных рекурсий (см. [13–17], а также монографии [1–6]). Метод бисопряженных градиентов BCG был предложен в [13, 14], а в [15, 16] были описаны вдвоенный метод бисопряженных градиентов

*) Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 08–01–00526).

CGS и стабилизированный метод бисопряженных градиентов BiCGStab, не использующие транспонированную матрицу A^t . Свойство устойчивости и сходимости этих итерационных схем исследовались, в том числе экспериментально, многими авторами (см., например, [15–18]).

Цель данной статьи состоит в расширении и дальнейшем изучении семейства биортогональных алгоритмов. В п. 1 описываются ортогональные и функциональные свойства методов бисопряженных направлений, к которым относятся BCG и его аналог — метод бисопряженных невязок BCR (Bi-Conjugate Residual). Пункт 2 содержит единообразное изложение сдвоенного метода бисопряженных невязок CRS (Conjugate Residual Squared) и его прототипа CGS. В п. 3 аналогичным образом представлены стабилизированный метод бисопряженных невязок BiCRStab (Bi-Conjugate Residual Stabilized) и его известный предшественник — метод BiCGStab. Свойства алгоритмов исследуются в предположении точных вычислений.

Последний раздел посвящен результатам численных экспериментов по решению рассмотренными итерационными схемами модельных трехмерных диффузионно-конвективных уравнений с различными коэффициентами, рассмотренных ранее в [12, 18]. Предобусловленные методы Крылова тестируются на различных сетках с разными значениями рестартовых параметров.

1. Алгоритмы бисопряженных градиентов и невязок. Рассмотрим решение алгебраической системы

$$Au = f, \quad u, f \in R^N, \quad A \in R^{N,N}, \quad (1)$$

где матрица A предполагается положительно определенной, т. е.

$$(Au, u) \geq \delta \|u\|^2, \quad \delta > 0, \quad (2)$$

$$(u, v) = (v, u) = \sum_{i=1}^N u_i v_i, \quad \|u\|^2 = (u, u).$$

Применим для решения СЛАУ (1) итерационный процесс

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, \quad r^0 = f - Au^0, \\ r^{n+1} &= r^n - \alpha_n A p^n, \quad \tilde{r}^{n+1} = \tilde{r}^n - \tilde{\alpha}_n A^t \tilde{p}^n, \\ p^{n+1} &= r^{n+1} + \beta_n p^n, \quad \tilde{p}^{n+1} = \tilde{r}^{n+1} + \tilde{\beta}_n \tilde{p}^n. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\alpha_n, \beta_n, \tilde{\alpha}_n$ и $\tilde{\beta}_n$ суть некоторые вещественные коэффициенты, u^n есть n -е итерационное приближение к искомому решению u ; r^n и p^n — соответствующие векторы невязки и коррекции. Будем называть векторы $\tilde{r}^n$ и $\tilde{p}^n$ двойственными векторами невязки и коррекции соответственно. Из формул

$$r^n = r^0 - \alpha_0 A p^0 - \dots - \alpha_{n-1} A p^{n-1}, \quad \tilde{r}^n = \tilde{r}^0 - \tilde{\alpha}_0 A^t \tilde{p}^0 - \dots - \tilde{\alpha}_{n-1} A^t \tilde{p}^{n-1} \quad (4)$$

следует, что векторы $r^n, \tilde{r}^n$ принадлежат подпространствам Крылова

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_n(A, r^0) &= \text{span}\{r^0, A r^0, \dots, A^{n-1} r^0\}, \\ \mathcal{K}_n(A^t, \tilde{r}^0) &= \text{span}\{\tilde{r}^0, A^t \tilde{r}^0, \dots, (A^t)^{n-1} \tilde{r}^0\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Векторы $p^0, \tilde{r}^0, \tilde{p}^0$ в (3) могут выбираться произвольно, но если мы определим $\tilde{r}^0 = \tilde{f} - A^t \tilde{u}^0$ для заданных векторов $\tilde{f}, \tilde{u}^0$, то последовательность $\tilde{u}^{n+1} = u^n + \alpha_n \tilde{p}^n$, если она сходится, имеет предельный вектор $\tilde{u}$, являющийся решением двойственного уравнения $A^t \tilde{u} = \tilde{f}$.

Скалярные итерационные параметры $\alpha_n, \beta_n, \tilde{\alpha}_n, \tilde{\beta}_n$ вычисляются в предположении выполнения условий ортогональности корректирующих векторов p^n и $\tilde{p}^n$:

$$(A^q p^n, A^t \tilde{p}^k) = \rho_n^{(q)} \delta_{k,n}, \quad \rho_n^{(q)} = (A^q p^n, A^t \tilde{p}^n), \quad (6)$$

где $q = 0$ или $q = 1$, а $\delta_{k,n}$ — символ Кронекера. Если векторы $r^n, p^n, \tilde{r}^n, \tilde{p}^n$ удовлетворяют соотношениям

$$(A^q r^n, \tilde{p}^k) = (A^q r^n, \tilde{p}^n) \delta_{k,n}, \quad (A^q p^k, \tilde{r}^n) = (A^q p^n, \tilde{r}^n) \delta_{k,n}, \quad (7)$$

то в силу (4) для итерационных параметров $\alpha_n, \tilde{\alpha}_n$ имеем

$$\alpha_n = (A^q r^0, \tilde{p}^n) / \rho_n^{(q)}, \quad \tilde{\alpha}_n = (\tilde{r}^0, A^q p^n) / \rho_n^{(q)}. \quad (8)$$

Далее из соотношений

$$(A^{q-1} r^n, \tilde{r}^n) = (A^{q-1} r^0, \tilde{r}^0) - \sum_{k=0}^{n-1} [\alpha_k (A^q p^k, \tilde{r}^0) + \tilde{\alpha}_k (A^q r^0, \tilde{p}^k) - \alpha_k \tilde{\alpha}_k \rho_k^{(q)}],$$

которые справедливы при условиях (6), легко видеть, что значения коэффициентов (8) обеспечивают свойства

$$\frac{\partial (A^{q-1} r^n, \tilde{r}^n)}{\partial \alpha_k} = \frac{\partial (A^{q-1} r^n, \tilde{r}^n)}{\partial \tilde{\alpha}_k} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1. \quad (9)$$

При этом выполняются следующие равенства:

$$(A^{q-1} r^n, \tilde{r}^n) = (A^{q-1} r^0, \tilde{r}^0) - \sum_{k=0}^{n-1} (A^q r^0, \tilde{p}^k) (A^q p^k, \tilde{r}^0) / \rho_k^{(q)}, \quad q = 0, 1. \quad (10)$$

Рассмотрим теперь скалярные произведения

$$(A^q r^n, \tilde{r}^k) = \left((A^q p^n - \beta_{n-1} A^q p^{n-1}), \left(\tilde{r}^0 - \sum_{i=0}^{k-1} \tilde{\alpha}_i A^t \tilde{p}^i \right) \right) \\ \times \left(\left(A^q r^0 - \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i A^{q+1} p^i \right), (\tilde{p}^k - \tilde{\beta}_{k-1} \tilde{p}^{k-1}) \right), \quad (11)$$

из которых при $k = n$ получаем соотношения

$$(A^q r^n, \tilde{r}^n) = (A^q p^n, \tilde{r}^0) = (A^q r^0, \tilde{p}^n) \quad (12)$$

и новые формулы для итерационных параметров

$$\alpha_n = \tilde{\alpha}_n = \sigma_n^{(q)} / \rho_n^{(q)}, \quad \sigma_n^{(q)} = (A^q r^n, \tilde{r}^n).$$

Отсюда выражения (10) могут быть сведены к виду

$$(A^{q-1} r^n, \tilde{r}^n) = (A^{q-1} r^0, \tilde{r}^0) - \sum_{k=0}^{n-1} (A^q r^k, \tilde{r}^k)^2 / \rho_k^{(q)}.$$

Из (11) при $k > n$ мы также имеем

$$(A^q r^n, \tilde{r}^n) = (A^q p^n, \tilde{r}^0) - \tilde{\alpha}_n (A^q p^n, A^t \tilde{p}^n) \\ - \beta_{n-1} [(A^q p^{n-1}, r^0) - \tilde{\alpha}_{n-1} (A^q p^{n-1}, A^t \tilde{p}^{n-1})] = 0,$$

а для $k < n$ справедливо равенство

$$(A^q r^n, \tilde{r}^k) = (A^q r^0, \tilde{p}^k) - \alpha_k(A^q p^k, A^t \tilde{p}^k) - \tilde{\beta}_{k-1}[(A^q r^0, \tilde{p}^{k-1}) - \tilde{\alpha}_{k-1}(A^q p^{k-1}, A^t \tilde{p}^{k-1})] = 0.$$

Таким образом, получаем важное ортогональное свойство

$$(A^q r^n, \tilde{r}^k) = \sigma_n^{(q)} \delta_{n,k}. \quad (13)$$

Заметим, что коэффициенты $\beta_n, \tilde{\beta}_n$ пока не определены. Чтобы это сделать, мы используем свойства (6):

$$\begin{aligned} (A^q p^{n+1}, A^t \tilde{p}^n) &= (A^q r^{n+1} + \beta_n A^q p^n, A^t \tilde{p}^n) = 0, \\ (A^q p^n, A^t \tilde{p}^{n+1}) &= (A^q p^n, A^t \tilde{r}^{n+1} + \tilde{\beta}_n A^t \tilde{p}^n) = 0, \end{aligned}$$

с помощью которых получаем

$$\beta_n = -(A^q r^{n+1}, A^t \tilde{p}^n) / \rho_n^{(q)}, \quad \tilde{\beta}_n = -(A^q p^n, A^t \tilde{r}^{n+1}) / \rho_n^{(q)}. \quad (14)$$

Если теперь мы учтем соотношения

$$A^t \tilde{p}^n = \frac{1}{\tilde{\alpha}_n}(\tilde{r}^n - \tilde{r}^{n+1}), \quad A^q p^n = \frac{1}{\alpha_n} A^{q-1}(r^n - r^{n+1})$$

и подставим их в (14), то приходим к новым формулам для $\beta_n, \tilde{\beta}_n$:

$$\beta_n = \tilde{\beta}_n = \sigma_{n+1}^{(q)} / \sigma_n^{(q)}. \quad (15)$$

Перейдем теперь к скалярному произведению

$$\begin{aligned} (A^q p^n, A^t \tilde{p}^n) &= ((A^q r^n + \beta_{n-1} A^q p^{n-1}), (A^t \tilde{r}^n + \tilde{\beta}_{n-1} A^t \tilde{p}^{n-1})) \\ &= (A^q r^n, A^t \tilde{r}^n) + \beta_{n-1}(A^q p^{n-1}, A^t \tilde{r}^n) + \tilde{\beta}_{n-1}(A^q r^n, A^t \tilde{p}^{n-1}) + \beta_{n-1} \tilde{\beta}_{n-1} \rho_{n-1}^{(q)}. \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что коэффициенты $\beta_n, \tilde{\beta}_n$ из (14), (15) обеспечивают условия

$$\frac{\partial(A^q p^n, A^t \tilde{p}^n)}{\partial \beta_{n-1}} = \frac{\partial(A^q p^n, A^t \tilde{p}^n)}{\partial \tilde{\beta}_{n-1}} = 0, \quad (16)$$

а соответствующие значения $\rho_n^{(q)}$ для $q = 0, 1$ равны

$$(A^q p^n, A^t \tilde{p}^n) = (A^q r^n, A^t \tilde{r}^n) - (A^q p^{n-1}, A^t \tilde{p}^{n-1}) \frac{(A^q r^n, \tilde{r}^n)^2}{(A^q r^{n-1}, \tilde{r}^{n-1})^2}. \quad (17)$$

Из соотношений (12), (15) следуют требования к выбору начальных векторов $\tilde{r}^0, p^0, \tilde{p}^0$ в случаях $q = 0$ или $q = 1$:

$$(A^q r^0, \tilde{r}^0) \neq 0, \quad (A^q p^0, A^t \tilde{p}^0) \neq 0. \quad (18)$$

На практике обычно следуют простейшему правилу

$$p^0 = \tilde{p}^0 = \tilde{r}^0 = r^0. \quad (19)$$

Очевидно, что формулы (3) при $q = 0$ и $q = 1$ определяют два различных алгоритма, но мы ради краткости опускаем индекс q в векторах. Из (3), (12)

и (15) для $q = 0$ определяется известный метод бисопряженных градиентов, который для симметричной матрицы $A = A^t$ при условиях (19) переходит в классический алгоритм сопряженных градиентов.

В случае $q = 1$ и $A = A^t$ формулы (3), (12), (15) описывают метод сопряженных невязок (см. [3–6]). По этой причине в общем случае $A \neq A^t$ определяемый ими метод будем называть *методом бисопряженных невязок*.

Известно, что для симметричных положительно определенных СЛАУ методы сопряженных градиентов и сопряженных невязок обеспечивают минимизацию функционалов $\Phi_n^{(q)} = (A^{q-1}r^n, r^n)$ в подпространствах Крылова $\mathcal{K}_n(A, r^0)$, а это вариационное свойство позволяет получить оценку скорости сходимости итераций через характеристики полиномов Чебышева первого рода.

В несимметричном случае соотношение (10) не гарантирует оптимизацию функционала и мы не можем получить оценку числа итераций. Если алгоритмы вида (3) при $q = 0$ или $q = 1$ не вырождаются, то векторы $p^0, p^1, \dots, p^n$ и $\tilde{p}^0, \tilde{p}^1, \dots, \tilde{p}^n$ линейно независимы и эти итерационные процессы при точных вычислениях сходятся к решению u системы (1) не более чем за N шагов.

2. Сдвоенные методы бисопряженных направлений. Векторы невязок и коррекции в рассмотренных алгоритмах бисопряженных направлений могут быть выражены через их начальные значения:

$$r^n = \varphi_n^{(q)}(A)r^0, \quad p^n = \psi_n^{(q)}(A)p^0, \quad \tilde{r}^n = \varphi_n^{(q)}(A^T)\tilde{r}^0, \quad \tilde{p}^n = \psi_n^{(q)}(A^T)\tilde{p}^0. \quad (20)$$

Здесь $\varphi_n^{(q)}(t)$ и $\psi_n^{(q)}(t)$ суть полиномы степени n со следующими условиями нормировки:

$$\psi_n^{(q)}(0) = n + 1, \quad \varphi_0^{(q)}(t) = \varphi_n^{(q)}(0) = \psi_0^{(q)}(t) = 1. \quad (21)$$

Эти многочлены удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$\varphi_{n+1}^{(q)}(t) = \varphi_n^{(q)}(t) - \alpha_n^{(q)}t\psi_n^{(q)}(t), \quad \psi_{n+1}^{(q)}(t) = \varphi_{n+1}^{(q)}(t) + \beta_n^{(q)}\psi_n^{(q)}(t). \quad (22)$$

Заметим также, что определяемые в (12), (15) скаляры α_n, β_n могут быть записаны с помощью формул

$$\alpha_n^{(q)} = \frac{(A^q\varphi_n^{(q)}(A)r^0, \varphi_n^{(q)}(A^T)\tilde{r}^0)}{(A^q\psi_n^{(q)}(A)p^0, A^T\psi_n^{(q)}(A^T)\tilde{p}^0)} = \frac{(A^q(\varphi_n^{(q)})^2(A)r^0, \tilde{r}^0)}{(A^q(\psi_n^{(q)})^2(A)p^0, A^T\tilde{p}^0)}, \quad (23)$$

$$\beta_n^{(q)} = (A^q(\varphi_{n+1}^{(q)})^2(A)r^0, \tilde{r}^0) / (A^q(\varphi_n^{(q)})^2(A)r^0, \tilde{r}^0).$$

Отсюда видно, что если мы определим новые векторы с помощью многочленов удвоенных порядков $2n$:

$$\begin{aligned} \bar{r}^n &= \Phi_n^{(q)}(A)r^0, & \bar{p}^n &= \Psi_n^{(q)}(A)p^0, \\ \Phi_n^{(q)}(t) &= (\varphi_n^{(q)})^2(t), & \Psi_n^{(q)}(t) &= (\psi_n^{(q)})^2(t), \end{aligned} \quad (24)$$

то с их помощью можно проводить вычисление величин $\alpha_n^{(q)}, \beta_n^{(q)}$. Для новых полиномов справедливы следующие рекуррентные соотношения:

$$\begin{aligned} \Phi_{n+1}^{(q)} &= \Phi_n^{(q)} - \alpha_n^{(q)}t(Y_n^{(q)} + X_{n+1}^{(q)}), & \Psi_n^{(q)} &= Y_n^{(q)} + \beta_n^{(q)}(X_n^{(q)} + \beta_n^{(q)}\Psi_{n-1}^{(q)}), \\ X_{n+1}^{(q)} &= Y_n^{(q)} - \alpha_n^{(q)}t\Psi_n^{(q)}, & Y_n^{(q)} &= \Phi_n^{(q)} + \beta_n^{(q)}X_n^{(q)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь введены вспомогательные многочлены $X_n^{(q)} = \psi_n^{(q)} \varphi_{n-1}^{(q)}$. Если мы определим векторы

$$v^n = X_n^{(q)}(A)r^0, \quad w^n = Y_n^{(q)}(A)r^0$$

и примем во внимание соотношения

$$\begin{aligned} \rho_n^{(q)} &\equiv (A^q \Phi_n^{(q)}(A)r^0, \tilde{r}^0) = (\tilde{r}^n, (A^q)^T \tilde{r}^0), \\ \sigma_n^{(q)} &\equiv (A^q \Psi_n^{(q)}(A)p^0, A^T \tilde{p}^0) = (A\tilde{p}^n, (A^q)^T \tilde{p}^0), \end{aligned}$$

то можно определить следующие двойные методы бисопряженных направлений, в которых предполагаются начальные условия (19):

$$\begin{aligned} r^0 &= f - Au^0, \quad p^0 = \tilde{p}^0 = \tilde{r}^0 = w^0 = r^0, \quad r_q^0 = (A^t)^q r^0, \\ \rho_n^{(q)} &= (r^n, r_q^0), \quad \sigma_n^{(q)} = (Ap^n, r_q^0), \quad \alpha_n^{(q)} = \rho_n^{(q)} / \sigma_n^{(q)}, \quad v^n = w^n - \alpha_n^{(q)} Ap^n, \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n^{(q)}(w^n + v^n), \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n^{(q)} A(w^n + v^n), \\ \beta_n^{(q)} &= \rho_{n+1}^{(q)} / \rho_n^{(q)}, \quad w^{n+1} = r^{n+1} + \beta_n^{(q)} v^n, \\ p^{n+1} &= w^{n+1} + \beta_n^{(q)}(v^n + \beta_n^{(q)} p^n). \end{aligned} \quad (26)$$

В этих формулах символы q и $\sim$ для векторов r^n , p^n ради краткости опускаются. Соотношения (7) при $q = 0$ дают известный двойной метод бисопряженных градиентов CGS, а при $q = 1$ его аналог будем называть *двойным методом бисопряженных невязок* CRS.

Заметим, что в методе CGS отсутствует умножение вектора на транспонированную матрицу A^t . Единственное отличие между методами CGS и CRS заключается в определении вектора r_q^0 , который вычисляется только один раз до итераций. При $q = 1$ нахождение скалярных параметров можно также определить по формулам

$$\rho_n^{(q)} = (A^q r^n, r^0), \quad \sigma_n^{(q)} = (A^q Ap^n, r^0),$$

так что метод CRS, как и CGS, можно считать не использующим A^t .

Вообще говоря, можно ожидать, что построенные алгоритмы при $q = 0$ и $q = 1$ будут сходиться в два раза быстрее, чем методы BCG и BCR соответственно. Действительно, если $\max_{t \in S} \{|\varphi(t)|\} = 1 - \delta$, $\delta \ll 1$, на спектре S матрицы A , то $\max_{t \in S} \{|\Phi(t)|\} \approx 1 - 2\delta$, что означает асимптотически уменьшение числа итераций вдвое.

3. Стабилизированные методы бисопряженных направлений. Мы рассмотрим в единообразной форме два алгоритма, которые при $q = 0$ представляют известный стабилизированный метод бисопряженных градиентов BiCGStab, а при $q = 1$ дают новый стабилизированный метод бисопряженных невязок BiCRStab.

Мотивировка предложенного Ван-дер-Ворстом алгоритма BiCGStab заключается в обеспечении более гладкой сходимости итераций, поскольку в методе BiCG зачастую наблюдается нерегулярный характер сходимости.

Рассмотрим итерационные процессы, в которых векторы невязок и коррекции определяются формулами

$$\bar{r}_n^{(q)} = \eta_n(A) \varphi_n^{(q)}(A) r^0, \quad \bar{p}_n^{(q)} = \eta_n(A) \psi_n^{(q)}(A) p^0, \quad (27)$$

где многочлены $\varphi_n^{(q)}$, $\psi_n^{(q)}$ порождаются методами BiCG и BiCR при $q = 0$ и $q = 1$ соответственно, а полиномы $\eta_n(t)$ удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$\eta_{n+1}(t) = (1 - \omega_n t) \eta_n(t) \quad (28)$$

с некоторыми скалярными параметрами ω_n , которые будут определены позже.
Из уравнений (22) имеем

$$\begin{aligned}\eta_{n+1}\varphi_{n+1}^{(q)} &= (1 - \omega_n t)(\eta_n \varphi_n^{(q)} - \alpha_n t \eta_n \psi_n^{(q)}), \\ \eta_n \psi_n^{(q)} &= \eta_n \varphi_n^{(q)} + \beta_{n-1}^{(q)}(1 - \omega_{n-1} t)\eta_{n-1}\psi_{n-1}^{(q)},\end{aligned}\quad (29)$$

откуда для векторов (27) следуют рекуррентные соотношения

$$\bar{r}_{n+1}^{(q)} = (I - \omega_n A)(\bar{r}_n^{(q)} - \alpha_n^{(q)} A \bar{p}_n^{(q)}), \quad \bar{p}_{n+1}^{(q)} = \bar{r}_{n+1}^{(q)} + \beta_n^{(q)}(I - \omega_n A)\bar{p}_n^{(q)}. \quad (30)$$

В силу ортогональных свойств (7) для векторов невязок и коррекции итерационные параметры $\alpha_n^{(q)}$ и $\beta_n^{(q)}$ могут быть переписаны в следующей единой форме (см. вывод для $q = 0$ в [4, 12]):

$$\begin{aligned}\alpha_n^{(q)} &= \rho_n^{(q)} / \sigma_n^{(q)}, \quad \beta_n^{(q)} = \alpha_n^{(q)} \rho_{n+1}^{(q)} / (\omega_n \rho_n^{(q)}), \\ \rho_n^{(q)} &= (\bar{r}_n^{(q)}, (A^T)^q r^0), \quad \sigma_n^{(q)} = (A \bar{p}_n^{(q)}, (A^T)^q p^0).\end{aligned}\quad (31)$$

Далее следует определить дополнительные параметры ω_n в многочленах $\eta_{n+1}(t)$. Один из простейших выборов ω_n заключается в организации шага наискорейшего спуска для нормы невязки, полученной до умножения на матрицу $I - \omega_n A$. Первое из уравнений (30) может быть переписано в виде

$$\begin{aligned}\bar{r}_{n+1}^{(q)} &= \bar{r}_n^{(q)} - \alpha_n^{(q)} A \bar{p}_n^{(q)} - \omega_n A s^n = (I - \omega_n A) s^n, \\ s^n &= \bar{r}_n^{(q)} - \alpha_n^{(q)} A \bar{p}_n^{(q)}, \quad \bar{r}_0^{(q)} = r^0.\end{aligned}\quad (32)$$

Тогда условие минимизации $\frac{\partial \|\bar{r}_{n+1}^{(q)}\|^2}{\partial \omega_n} = 0$ дает оптимальное значение ω_n в следующей форме:

$$\omega_n = (A s^n, s^n) / (A s^n, A s^n). \quad (33)$$

Наконец, следует выписать формулу для нового итерационного приближения $u_{n+1}^{(q)}$, которая получается из выражения (32) для невязки:

$$u_{n+1}^{(q)} = u_n^{(q)} + \alpha_n^{(q)} \bar{p}_n^{(q)} + \omega_n s^n, \quad \bar{r}_n^{(q)} = f - A u_n^{(q)}. \quad (34)$$

После объединения предыдущих соотношений мы получаем унифицированное представление для BiCGStab и BiCRStab при $q = 0$ и $q = 1$ соответственно:

$$\begin{aligned}r^0 &= f - A u^0, \quad r_0^{(q)} = p_0^{(q)} = r^0, \quad n = 0, 1, \dots, \\ \alpha_n^{(q)} &= (r^n, (A^T)^q r^0) / (A p^n, (A^T)^q r^0), \quad u_0^{(q)} = u^0, \\ s^n &= r_n^{(q)} - \alpha_n^{(q)} A p_n^{(q)}, \quad \omega_n = (A s^n, s^n) / (A s^n, A s^n), \\ u_{n+1}^{(q)} &= u_n^{(q)} + \alpha_n^{(q)} p_n^{(q)} + \omega_n s^n, \quad r_{n+1}^{(q)} = s^n - \omega_n A s^n, \\ \beta_n^{(q)} &= [\alpha_n^{(q)} (r^{n+1}, (A^T)^q r^0)] / [\omega_n (r^n, (A^T)^q r^0)], \\ p_{n+1}^{(q)} &= r_{n+1}^{(q)} + \beta_n^{(q)} (p_n^{(q)} - \omega_n A p_n^{(q)}).\end{aligned}\quad (35)$$

4. Численные результаты. Проведем сравнительный анализ эффективности шести рассмотренных итерационных «решателей» на представительном наборе СЛАУ, получаемых из трехмерной задачи Дирихле для диффузионно-конвективного уравнения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + p \frac{\partial u}{\partial x} + q \frac{\partial u}{\partial y} + r \frac{\partial u}{\partial z} = f(x, y, z), \quad (36)$$

$$(x, y, z) \in \Omega = [0, 1]^3, \quad u|_{\Gamma} = g(x, y, z).$$

Аппроксимация данной краевой задачи осуществляется с помощью конечно-объемной схемы экспоненциального типа [18] на кубических сетках с шагами $h = 1/(M + 1)$, где число разбиений в каждом измерении выбиралось равным $M = 32, 64, 128, 256$. Получаемые семидиагональные матрицы с порядками $(M - 1)^3$ являются монотонными для любых значений конвективных коэффициентов p, q, r , которые в экспериментах выбирались постоянными или переменными, положительными или отрицательными. В целом рассмотрено 10 различных комбинаций p, q, r , для которых результаты расчетов со стандартной двойной точностью представлены ниже в табл. 1–9. Во всех экспериментах использовался критерий окончания итераций $(r^n, r^n) \leq (f, f)\varepsilon^2$ при $\varepsilon = 10^{-7}$, что обеспечивало относительную ошибку итерационного решения примерно 10^{-6} .

В (36) были выбраны простейшие функции f, g , обеспечивающие точное решение краевой задачи $u(x, y, z) = 1$. Начальное значение u^0 во всех итерационных процессах использовалось равным

$$u^0(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2. \quad (37)$$

Отметим, что поведение итерационных алгоритмов зависит от характера начальной ошибки $u - u^0$, однако в проведенных многочисленных расчетах с другими начальными приближениями u^0 , которые мы не приводим, сравнительные свойства сходимости рассмотренных методов остаются примерно одинаковыми.

Итерационные методы в подпространствах Крылова реализовывались с предобуславливающей матрицей вида

$$B = (G - L)G^{-1}(G - U), \quad G = \frac{1}{\omega}D - \theta S, \quad Se = \left(\frac{1 - \omega}{\omega}D + LG^{-1}U \right) e, \quad (38)$$

где D, L и U суть диагональная, нижняя треугольная и верхняя треугольная части исходной матрицы $A = D - L - U$; G и S — диагональные матрицы; e — вектор с единичными компонентами; ω и θ — релаксационный и компенсирующий параметры соответственно.

В действительности решатели применяются к предобусловленной СЛАУ

$$\begin{aligned} \bar{A}\bar{u} &= \bar{f} = (I - \bar{L})^{-1}G^{-1/2}f, \quad \bar{u} = (I - \bar{U})G^{-1/2}u, \\ \bar{A} &= (I - \bar{L})^{-1} - (I - \bar{U})^{-1} - (I - \bar{L})^{-1}(2I - \bar{D})(I - \bar{U})^{-1}, \\ \bar{L} &= G^{-1/2}LG^{-1/2}, \quad \bar{U} = G^{-1/2}UG^{-1/2}, \quad \bar{D} = G^{-1/2}DG^{-1/2}. \end{aligned} \quad (39)$$

Реализация итерационных шагов осуществляется с помощью экономичной модификации Айзенштата, в которой умножение на предобусловленную матрицу $\bar{A}$ требует примерно такого же объема арифметических операций, что и умножение на исходную матрицу A :

$$\bar{A}v = (I - \bar{L})^{-1}[v - (2I - \bar{D})w] + w, \quad w = (I - \bar{U})^{-1}v. \quad (40)$$

В представленных результатах использовались варианты крыловских итераций с периодическими рестартами через каждые m шагов: на каждой итерации с номером $n_l = lm$, $l = 0, 1, 2, \dots$, вектор невязки вычисляется не из рекуррентных соотношений, а из исходного предобусловленного уравнения, т. е. $r^{n_l} = f - A\bar{u}^{n_l}$, после чего процесс биортогонализации возобновляется.

В каждой клетке таблиц представлены количества итераций для значений параметров рестартов $m = 100, 20, 10$ сверху вниз соответственно. В табл. 1–6 для простоты используются итерационные параметры $\omega = \theta = 1$. Результаты для предобусловленных методов BCG и BCR содержатся в табл. 1, 2.

Т а б л и ц а 1

Результаты для метода BCG, $\omega = \theta = 1$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	7	13	22	23	20	14	7	31	30	26
	7	13	20	24	22	14	7	31	28	26
	7	14	21	26	23	14	7	31	28	27
64	10	20	30	35	32	21	11	45	49	38
	10	20	32	37	29	20	11	45	41	39
	10	25	31	42	30	21	10	80	78	44
128	20	34	42	51	43	35	21	78	75	55
	20	33	44	55	43	32	20	85	98	59
	21	38	42	65	44	31	20	138	177	67
256	38	52	58	74	58	52	41	108	108	79
	41	48	64	86	61	49	43	142	148	90
	31	47	61	104	70	62	32	244	265	108

Т а б л и ц а 2

Результаты для метода BCR, $\omega = \theta = 1$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	7	13	21	23	20	13	6	30	29	25
	7	13	20	23	20	13	6	28	28	25
	7	14	20	25	27	14	6	32	31	27
64	10	20	30	33	29	19	11	44	48	35
	10	20	28	35	29	19	11	42	41	37
	10	22	28	39	29	20	10	68	80	42
128	19	31	41	48	43	32	19	108	78	51
	19	29	39	53	41	30	19	82	102	56
	18	33	40	61	41	34	18	178	233	64
256	37	50	58	70	58	50	39	109	105	75
	33	43	60	78	56	46	41	173	185	87
	27	41	58	101	66	45	31	189	282	106

Как видно из табл. 1, 2, число итераций в методе BCR несколько меньше, чем в BCG. При $p = q = r = 0$ решаемые СЛАУ являются симметричными и данные методы переходят в «классические» алгоритмы сопряженных градиентов CG и сопряженных невязок CR. Отметим, что с ростом n для

последнего характерно монотонное убывание нормы невязки, а для CG — осциллирующее.

В табл. 3, 4 даны аналогичные результаты для предобусловленных двояных методов бисопряженных градинетов и невязок. Символ ∞ здесь означает расходимость итераций, которое иногда имеет место в силу нарушения численной устойчивости алгоритмов к погрешностям машинных округлений.

Т а б л и ц а 3

Результаты для метода CGS, $\omega = \theta = 1$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	3	9	13	14	14	8	3	16	14	17
	3	9	13	14	14	8	3	16	14	17
	3	9	14	16	14	8	3	17	15	19
64	6	14	18	23	18	13	6	24	22	27
	6	14	18	25	18	13	6	24	24	30
	6	16	19	25	19	12	6	52	41	28
128	16	20	25	∞	26	19	16	38	38	43
	16	22	33	∞	28	19	16	41	54	39
	21	39	39	38	34	23	16	367	∞	54
256	31	30	37	∞	38	29	34	61	70	68
	37	44	43	∞	43	37	38	224	200	72
	48	44	94	66	53	55	31	144	∞	72

Т а б л и ц а 4

Результаты для метода CRS, $\omega = \theta = 1$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	3	9	12	14	11	8	3	15	14	17
	3	9	12	14	11	8	3	15	14	17
	3	9	11	14	18	8	3	19	17	15
64	6	13	18	21	18	12	6	23	23	24
	6	13	18	21	18	12	6	22	23	20
	6	13	16	22	16	11	6	38	31	25
128	14	20	25	∞	26	19	15	38	37	39
	14	20	21	28	24	19	15	37	44	30
	11	19	30	30	24	18	11	68	58	30
256	31	30	37	∞	30	28	33	58	69	58
	23	24	33	40	34	24	23	78	87	44
	15	24	36	42	40	27	15	92	87	46

Как отсюда следует, метод CRS более устойчив в сравнении с CGS, а также обеспечивает хорошую сходимость итераций при средних значениях параметра рестарта ($m \approx 20$). С ростом m количество итераций теоретически должно уменьшаться, однако практически иногда наблюдается их возрастание.

В табл. 5, 6 приведены результаты для двух стабилизированных алгоритмов. Из них видно, что предобусловленные методы BiCGStab и BiCRStab демонстрируют хорошую устойчивость и скорость сходимости итераций для

всех рассмотренных значений конвективных коэффициентов p, q, r , рестартового параметра m и числа шагов сетки M .

Т а б л и ц а 5
Результаты для метода BiCGStab, $\omega = \theta = 1$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	4	9	12	16	12	8	4	18	16	17
	4	9	12	16	12	8	4	18	16	17
	4	9	13	16	13	8	4	18	17	16
64	6	12	16	24	18	12	6	28	27	22
	6	12	16	24	18	12	6	28	28	23
	6	13	17	24	20	13	6	35	33	24
128	11	17	24	38	25	16	9	45	43	33
	11	17	23	31	24	16	9	51	57	32
	11	20	25	33	27	18	9	71	87	35
256	16	23	34	55	33	25	16	66	74	52
	16	24	35	46	36	25	16	86	131	52
	15	27	35	46	37	25	16	109	139	49

Т а б л и ц а 6
Результаты для метода BiCRStab, $\omega = \theta = 1$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	4	9	12	17	12	8	4	18	16	16
	4	9	12	17	12	8	4	18	16	16
	4	9	14	16	14	8	4	18	17	16
64	6	12	16	26	17	12	6	29	27	25
	6	12	16	25	17	12	6	28	29	26
	6	13	18	22	18	13	6	33	32	24
128	9	17	25	40	26	17	9	44	43	37
	9	17	24	32	25	17	9	48	54	32
	9	19	29	35	25	19	9	65	66	36
256	16	24	34	53	36	23	16	69	77	53
	16	24	32	45	34	25	16	82	110	48
	15	25	32	48	49	27	17	118	99	49

Поскольку скорость сходимости итераций рассмотренных алгоритмов зависит от свойств предобуславливающей матрицы B из (38) и предобусловленной системы (39), представляет интерес вопрос об автоматизации выбора итерационных параметров, адаптированных к конкретным СЛАУ. Как отмечалось в [18], алгоритмы их оптимизации представляются слишком трудоемкими, поэтому мы приведем только результаты применения эмпирического приема, заключающегося в выборе релаксационного параметра ω (при фиксированном значении компенсирующего параметра θ) из условия $(Be, e) = (Ae, e)$, которое приводит к формуле

$$\omega = \frac{(e, e) - \sqrt{(e, e)^2 - 4(\bar{L}\bar{U}e, e)(e, e)}}{2(\bar{L}\bar{U}e, e)}. \quad (41)$$

Здесь в правой части использовались значения параметров $\omega = \omega_0 = 1$ и $\theta = 0,975$. Полученные результаты для метода BCR представлены в табл. 7.

Т а б л и ц а 7

Результаты для метода BCR с выбором ω по формуле (41), $\omega_0 = 1$, $\theta = 0,975$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	6	14	21	22	21	14	6	29	30	23
	6	14	22	22	21	14	6	29	27	24
	6	13	21	24	23	13	6	28	27	24
64	10	22	30	30	28	21	10	44	45	31
	10	21	26	31	26	21	10	43	41	32
	10	21	27	33	30	24	10	64	84	34
128	22	37	40	40	38	33	19	73	75	42
	20	30	36	42	36	34	19	74	81	43
	20	35	36	45	37	41	22	124	147	46
256	45	59	54	54	60	59	42	106	109	56
	41	69	53	58	64	50	44	188	213	60
	36	50	56	68	62	52	35	235	236	69

Аналогичные данные для метода CRS приведены в табл. 8 с использованием дополнительного приема. А именно, при каждом рестарте первая итерация реализуется с помощью простого алгоритма минимальных невязок по формулам

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + \alpha_n r^n, \quad r^n = f - Au^n, \quad n = n_l = lm, \quad l = 0, 1, \dots, \\ r^{n+1} &= r^n - \alpha_n Ar^n, \quad \alpha_n = (Ar^n, r^n) / (Ar^n, Ar^n). \end{aligned} \quad (42)$$

Мотивировкой этого приема является сглаживание начальных осцилляций в поведении нормы невязки, которое зачастую наблюдается в экспериментах с методом CRS.

Т а б л и ц а 8

Результаты для метода CRS по формулам (41), (42), $\omega_0 = 1$, $\theta = 0,975$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	4	11	12	13	10	15	4	21	15	14
	4	11	12	13	10	15	4	21	15	14
	4	11	12	13	10	15	4	21	15	14
64	6	19	14	17	17	13	6	54	43	19
	6	19	14	17	17	13	6	54	43	19
	6	19	15	21	17	13	6	54	43	19
128	10	19	29	22	23	18	11	55	88	27
	10	19	29	23	23	18	11	55	88	24
	10	19	29	25	21	18	11	47	75	25
256	31	49	62	31	42	54	20	97	149	32
	31	49	62	32	32	54	20	97	149	33
	31	49	62	34	37	54	20	97	141	37

Для сравнения эффективности рассмотренных выше алгоритмов в табл. 9 мы даем аналогичные результаты для описанного в [12] метода полусогранных невязок SCR, который минимизирует нормы невязок в подпространствах Крылова, но требует значительных ресурсов для хранения и вычисления координирующих векторов.

Т а б л и ц а 9

Результаты для метода SCR по формулам (39)–(41), $\omega_0 = 1$, $\theta = 0,975$

N	p, q, r									
	$-64, -64, -64$	$-16, -16, -16$	$-4, -4, -4$	$0, 0, 0$	$4, 4, 4$	$16, 16, 16$	$64, 64, 64$	$64, 64, -64$	$64, -64, -64$	$1 - 2x, 0, 0$
32	6	13	18	22	18	12	5	25	24	23
	6	13	18	22	18	12	5	29	27	24
	6	13	19	24	18	12	5	38	36	24
64	9	19	26	30	25	19	9	35	35	31
	9	19	26	31	26	19	9	55	56	32
	9	20	26	33	26	19	9	68	79	34
128	16	29	35	40	36	29	16	53	53	42
	16	30	35	42	36	31	16	114	132	43
	16	31	37	47	38	32	16	118	145	48
256	29	42	50	54	50	43	29	79	79	56
	30	49	52	60	52	50	29	210	244	61
	30	51	57	70	60	49	30	188	266	72

Приведенные экспериментальные результаты позволяют сделать следующие выводы.

1. Предложенные методы бисогранных невязок расширяют класс итерационных методов в подпространствах Крылова и в целом обладают большей устойчивостью в сравнении с аналогичными известными алгоритмами бисогранных градиентов.

2. Для рассмотренного представительного класса сеточных диффузионно-конвективных краевых задач методы бисогранных направлений с используемыми предобуславливающими матрицами демонстрируют высокую эффективность в широком диапазоне изменения конвективных коэффициентов и числа узлов сетки.

3. Исследованные варианты алгоритмов с разными параметрами рестартов m обнаруживают слабую зависимость числа итераций от значения m , что позволяет рекомендовать их средние значения $m \approx 50$ без практического риска потери эффективности.

4. Хотя данные методы и не обладают вариационными свойствами при решении несимметричных СЛАУ, они оказываются вполне конкурентноспособными с методом SCR, обеспечивающим минимизацию нормы невязки, поскольку сравнительное увеличение количества итераций компенсируется экономичностью реализации каждой итерации.

5. Эмпирический прием выбора релаксационного параметра ω позволяет заметно повысить скорость сходимости итераций, хотя вопрос о его оптимизации требует дальнейших исследований.

Автор выражает искреннюю благодарность Е. А. Ицкович за проведение численных расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.: Физматгиз, 1960.
2. Axelsson O. Iterative Solution Methods. Cambridge: Univ. Press, 1994.
3. Golub G. H., Van Loan C. Matrix Computations. Baltimore: John Hopkins Univ. Press, 1996.
4. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. N. Y.: PWS Publ., 1996.
5. Ильин В. П. Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Наука, 1995.
6. Ильин В. П. Методы и технологии конечных элементов. Новосибирск: Изд. ИВМиГ СО РАН, 2007.
7. Ильин В. П. Об итерационном методе Качмажа и его обобщениях // Сиб. журн. индустр. математики. 2006. Т. 9, № 3. С. 39–49.
8. Ильин В. П. О методах сопряженных и полусопряженных направлений с предобуславливающими проекторами // Докл. РАН. 2008. Т. 419, № 3. С. 303–306.
9. Saad J., Schultz M. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1986. V. 7. P. 856–869.
10. Stewart G. W. Conjugate direction methods for solving systems of linear equations // Numer. Math. 1973. V. 21. P. 285–297.
11. Juan J. Y., Golub G. H., Plemmons R. J., Cecilio W. A. G. Semi-conjugate direction methods for real positive definite systems. Stanford Univ. Tech. Rep. SCCM-02-02, 2003.
12. Ильин В. П., Ицкович Е. А. О методах полусопряженных направлений с динамическим предобуславливанием // Сиб. журн. вычисл. математики. 2007. Т. 10, № 4. С. 41–54.
13. Lanczos C. Solution of systems of linear equations by minimized iterations // J. Res. Nat. Bureau of Standards. 1952. N 49. P. 33–53.
14. Fletcher R. Conjugate gradient methods for indefinite systems // Proc. of the Dundee Biennial Conf. on Numerical Analysis. N. Y.: Springer Verl., 1975. P. 73–89.
15. Sonneveld P. CGS, a fast Lanczos-type solver for non-symmetric linear systems // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1989, V. 10(1). P. 36–52.
16. Van der Vorst H. A. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of non-symmetric linear systems // SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1992. V. 12. P. 631–644.
17. Graves-Morris P. R. The breakdowns of BiCGStab // Numer. Algorithms. 2002. V. 29. P. 97–105.
18. Andreeva M. Yu., Il'in V. P., Itskovich E. A. Two solvers for nonsymmetric SLAE // Bull. Novosibirsk Comput. Center. Ser. Num. Anal. 2004. N 12. P. 1–16.

Статья поступила 1 августа 2008 г.

Ильин Валерий Павлович
Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН
пр. Лаврентьева, 6
630090 г. Новосибирск
Новосибирский госуниверситет
ул. Пирогова, 2
630090 г. Новосибирск
E-mail: ilin@sscc.ru