О методах сопряженных и полусопряженных направлений с предобуславливающими проекторами

В.П.Ильин

1. Введение

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

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

для которой есть сходящийся стационарный итерационный процесс

$$u^{k+1} = Bu^k + g, \quad u^k \underset{k\to\infty}{\longrightarrow} u, \quad g = (I - B)A^{-1}f, \tag{2}$$

с матрицей перехода B, имеющей собственные числа $\lambda_q(B)$ и спектральный радиус $\rho = \max\limits_q\{|\lambda_q(B)|\} < 1$. Тогда вектор u есть решение системы

$$\tilde{A}u \equiv (I - B)u = g, \tag{3}$$

где I – единичная, а $\tilde{A}$ – предобусловленная по отношению к A матрица. Если $\tilde{A}$ – симметричная положительно определенная (с.п.о.) матрица, то она имеет спектральное число обусловленности

$$æ = \|\tilde{A}\|_2\|\tilde{A}^{-1}\|_2 = (1+\rho)/(1-\rho). \tag{4}$$

и для решения СЛАУ (3) применим какой-нибудь из итерационных методов сопряженных направлений, см.[1]–[4],

$$\begin{aligned}
&r^0 = g - \tilde{A}u, \quad p^0 = r^0; \quad n = 0, 1, \dots : \\
&u^{n+1} = u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n \tilde{A}p^n, \\
&p^{n+1} = r^{n+1} + \beta_n p^n,
\end{aligned} \tag{5}$$

обладающий свойством оптимальности в подпространствах Крылова $\mathcal{K}_{n+1}(r^0,\tilde{A}) = span\{p^0,\tilde{A},p^0p^1,...,\tilde{A}^n,p^0\}$ В методах сопряженных градиентов и сопряженных невязок (СГ и СН) итерационные параметры $\alpha_n^{(s)},\beta_n^{(s)}$ в соотношениях (5) определяются следующим образом:

$$\alpha_n^{(s)} = (\tilde{A}^s r^n, r^n)/(\tilde{A}p^n,\tilde{A}^s p^n), \quad \beta_n^{(s)} = (\tilde{A}^s r^{n+1}, r^{n+1})/(\tilde{A}^s r^n, r^n). \qquad (6)$$

Здесь $s = 0,1$ для МСГ и МСН соответственно. Эти алгоритмы порождают векторы невязок и направлений r^n, p^n со свойствами ортогональности

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

и минимизируют в подпространствах Крылова функционалы $\Phi_n^{(s)}(r^n) = (\tilde{A}^{s-1}r^n, r^n)$, $\quad s = 0,1$, для уменьшения которых по условию: $(\Phi_n^{(s)}(r^n)/$ $/\Phi_0^{(s)}(r^0))^{1/2} \le \varepsilon^2 < 1$ – необходимое число итерации оценивается как

$$n(\varepsilon) \le 1 + \Big(ln\frac{1+\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon}\Big)/ln\gamma, \quad \gamma = (\sqrt{æ}+1)/(\sqrt{æ}-1). \qquad (8)$$

Если матрица $\tilde{A}$ несимметрична, но является положительно определенной, т.е. $(\tilde{A}u,u) \ge \delta(u,u), \delta > 0$, $u \ne 0$, то для решения системы (3) предлагается метод полусопряженных невязок (ПСН), являющийся устойчивой модификацией описанного в [5] метода обобщенных сопряженных невязок. В ПСН векторы u^{n+1}, r^{n+1} вычисляются по формулам (5), где коэффициенты α_n находятся из (6) при $s = 1$, а направляющие векторы p^{n+1} определяются из "длинных" рекурсий:

$$\begin{aligned} &p^{n+1,0} = r^{n+1}, \quad p^{n+1,l} = p^{n+1,l-1} + \beta_{n,l}p^{l-1}, \quad l = 1,...,n, \\ &\beta_{n,l} = -(\tilde{A}p^l,\tilde{A}p^{n+1,l-1})/(\tilde{A}p^l,\tilde{A}p^l), \quad p^{n+1} = p^{n+1,n}. \end{aligned} \qquad (9)$$

Формулы (5), (9) реализуют построение A^tA-ортогональных векторов $p^0,p^1,...,p^{n+1}$ (A^t означает транспонированную матрицу) с помощью модифицированной ортогонализации Грама–Шмидта [6]. При этом в подпространстве $\mathcal{K}_{n+1}(r^0,\tilde{A})$ минимизируется функционал $\Phi_n^{(1)}(r^n) = (r^n,r^n)$, а векторы невязки r^n оказываются правыми полусопряженными в смысле выполнения равенств $(\tilde{A}r^k,r^n) = 0$ при $k < n$.

2. Проекционные методы мультипликативного типа

Обозначим через $\Omega = \{i = 1, 2, ..., N\}$ множество номеров строк матрицы A, а через $\Omega_p, p = 1, 2, ..., l,$ – его непересекающиеся подмножества с количествами своих элементов m_p такие, что $\Omega = \bigcup\limits_{p=1}^{l} \Omega_p,\ \ m_1 + ... + m_l = N$. Соответственно введем подвекторы $u_{(p)}, f_{(p)}, p = 1, ..., l,$ порядков m_p и прямоугольные подматрицы $A_{(p)}$ размеров $m_p \times N$:

$$u_{(p)} = \{u_i, i \in \Omega_p\}, \quad f_{(p)} = \{f_i, i \in \Omega_p\}, \quad A_{(p)} = \{A_i, i \in \Omega_p\}, \tag{10}$$

где A_i–i-я строка матрицы A. Тогда СЛАУ (1) записывается как

$$A_{(p)}u = f_{(p)}, \quad p = 1, 2, ..., l. \tag{11}$$

Для ее решения рассмотрим итерационный процесс, в котором вычисление каждого n-го приближения состоит из l шагов:

$$u^{n,p} = u^{n,p-1} + \omega A^+_{(p)} r^{n,p-1}_{(p)}, \quad n = 1, 2, ..., \quad p = 1, 2, ..., l, \quad u^n = u^{n,l}. \tag{12}$$

Здесь $u^{0,0} = \{u^0_i, i = 1, 2, ..., N\}$ – начальный вектор, ω – некоторый итерационный параметр, $r^{n,p-1}_{(p)} = f_{(p)} - A_{(p)}u^{n,p-1}$ – подвектор невязки m_p-го порядка, а $A^+_{(p)}$ – псевдообратная к $A_{(p)}$ матрица, определяемая формулой (если $A_{(p)}$ имеет полный ранг m) $A^+_{(p)} = A^t_{(p)}(A_{(p)}A^t_{(p)})^{-1}$.

Отсюда следует, что $I - A^+_{(p)}A_{(p)}$ является симметричной положительно полуопределенной матрицей ортогонального проектирования на p-е подпространство, геометрически представляемое объединением подпространств, определяемых строками $A_i,\ \ i \in \Omega_p$.

Итерационный метод (12) может быть записан в матричной форме

$$u^n = Bu^{n-1} + g,\ \ B = (I - T_l)\cdots(I - T_1),\ \ T_p = \omega A^+_{(p)}A_{(p)}. \tag{13}$$

Проекционный метод (12), (13) при $\omega = 1$ и $m_p = 1$ представляет собой предложенный в [7] “поточечный"алгоритм Качмажа. Его обобщения и исследования осуществлялись разными авторами, см. [8], [9].

В работе [10] для абстрактного итерационого мультипликативного проекционного метода вида (13) доказано следующее утверждение.

Теорема 1. *Пусть T_p, $p = 1, ..., l$ – с.п.о. матрицы, и для любого вектора $v \in R^N$ выполняются неравенства*

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

Тогда для евклидовой нормы B из (13) справедлива оценка

$$\|B\| \leq \rho = 1 - (2 - \alpha)/\{\beta[l + \alpha^2 l(l-1)/2]\}$$

.

Если матрицы $\bar{T}_p = \omega^{-1} T_p$ для всех p удовлетворяют условиям

$$(\bar{T}_p v, v)/(v, v) \leq \bar{\alpha} < 2, \quad \|v\| \leq \bar{\beta}[(\bar{T}_1 v, v) + ... + (\bar{T}_l v, v)],$$

то при выборе $\omega = 1/\bar{\alpha}\sqrt{(l-1)l}$ получаем $\rho = 1 - (3\bar{\beta}\bar{\alpha} l)^{-1}$.

Заметим, что матрица перехода B итерационного процесса (13), в силу неперестановочности T_p, не является симметричной.

Рассмотрим теперь альтернирующий блочный метод Качмажа, в котором каждая итерация состоит из двух полушагов. Первый из них заключается в обычной реализации формул (12) или (13), а второй – в выполнении аналогичных вычислений в обратном порядке по индексу p:

$$\begin{aligned} & u^{n+1/2,p} = u^{n,p-1} + \omega A^+_{(p)} r^{n,p-1}_{(p)}, \\ & p = 1, 2, ..., l, \quad u^{n+1/2} = u^{n+1/2,l} = u^{n+1/2,l+1}, \\ & u^{n+1,p} = u^{n+1/2,p+1} + \omega A^+_{(p)} r^{n+1/2,p+1}_{(p)}, \\ & \qquad p = l, ..., 2, 1, \quad u^{n+1} = u^{n+1,1}. \end{aligned} \tag{14}$$

Матрица перехода в итерациях (14) есть произведение матриц $B = B_2 B_1$, где B_1 – это B из формулы (13), а B_2 имеет вид

$$u^{n+1} = B_2 B_1 u^n + g, \quad B_2 = (I - T_1)(I - T_2) \cdots (I - T_l) = B_1^t. \tag{15}$$

При выполнении условий теоремы 1 для каждой из матриц B_1, B_2 справедлива оценка $||B_k|| \leq \rho$, в силу чего для матрицы перехода альтернирующего метода (14) имеем $||B|| \leq ||B_1|| \cdot ||B_2|| \leq \rho^2 < 1$.

Поскольку метод (14) представим в форме (2) с с.п.о. матрицей B, то мы можем ускорить сходимость итераций с помощью алгоритмов сопряженных направлений, формально примененных к предобусловленной СЛАУ (3), что позволяет установить следующее утверждение.

Теорема 2. *Альтернирующие мультипликативные проекционные методы сопряженных направлений (АМПМСН), определяемые соотношениями* (3), (5) *и* (6) *при* $s = 0, 1$, *а также* (14), (15), *сходятся в условиях теоремы 1, причем для числа* $n(\varepsilon)$ *справедлива оценка* (8), *где* $æ = (1 + \rho^2)/(1 - \rho^2)$, *а величина* ρ *определена в теореме 1.*

Рассмотрим теперь последовательно-проектирующий метод полусопряженных невязок (ППМПСН), являющийся альтернативой рассмотренному выше АМПМСН и основан на ускорении алгоритма (13), в котором матрица перехода B несимметрична, с помощью итераций в подпространствах Крылова по формулам (5), (9), где предобусловленная матрица определяется из (3), (13). ППМПСН обладает той особенностью, что для нахождения u^{n+1} необходимо хранить все предыдущие векторы $p^0, ..., p^n$, как и в GMRES, см. [4]. Эти два метода обладают одинаковыми свойствами сходимости, поскольку они обеспечивают минимальность функционала $\Phi_n^{(1)}(r^n)$ в подпространстве $\mathcal{K}_{n+1}(r^0, \tilde{A})$. Для данного мультипликативного метода справедлив следующий результат.

Теорема 3. *Пусть мультипликативный алгоритм ППМПСН, определяемый формулами* (3), (5), (6), *при* $s = 1$, *а также (9), (11)–(13), имеет диагонализируемую матрицу* $\tilde{A} = X \Lambda X^{-1}, \Lambda = diag(\lambda_1, ..., \lambda_N)$, *где* Λ_i *– собственные числа матрицы* $\tilde{A}$, *а* X *– квадратная матрица, столбцы которой являются соответствующими собственными векторами. Тогда в условиях теоремы 1 этот метод сходится, причем для* $n(\varepsilon)$ *справедлива оценка*

$$n(\varepsilon) \le 1 + \Big(ln\frac{1+\sqrt{1-\varepsilon_1^2}}{\varepsilon_1}\Big)/ln\gamma, \quad \varepsilon_1 = \varepsilon/(\|X\|_2 \cdot \|X^{-1}\|_2).$$

Здесь $\gamma_1 = a + \sqrt{a^2 - d^2}, \gamma_2 = c + \sqrt{c^2 - d^2}$, *а* c, d, a *– координата центра, фокусное расстояние* ($d^2 < c^2$) *и длина главной полуоси эллипса, содержащего все* λ_i *в комплексной плоскости.*

Отметим, что для метода ППМПСН, как и для GMRES, возможно построение модификаций с ограничением количества хранимых направляющих векторов. Это позволяет экономить вычислительные ресурсы для реализации каждой итерации, но приводит к увеличению $n(\varepsilon)$.

3. Аддитивные проекционные методы

В работах [11]–[13] (см. также приведенную там литературу) рассматриваются варианты итерационного метода Чиммино, в котором, как и в алгоритме Качмажа, один элементарный шаг заключается в проецировании точки N-мерного пространства на гиперплоскость, описываемую i-м уравнением исходной СЛАУ. Однако, если в первом случае эти операции выполняются последовательно, что эквивалентно последовательному умножению соответствующих проекторов, то во втором — одновременно: для заданного приближения u^n находятся все проекции $u^{n,i}$ на гиперплоскости A_i, а новое значение u^{n+1} определяется как их линейная комбинация. Такой аддитивный проекционный алгоритм в блочном варианте для решения СЛАУ (11) записывается как

$$u^{n,p} = u^{n-1} + A^+_{(p)} r^{n-1}_{(p)}, \quad p = 1, 2, ..., l, \quad u^n = (u^{n,1} + u^{n,2} + ... + u^{n,l})/l, \tag{16}$$

что эквиалентно следующей матричной форме:

$$\begin{aligned} u^n = Bu^{n-1} + g, \quad B = I - l^{-1}\sum_{p=1}^{l} A^+_{(p)} A_{(p)} = \\ = I - l^{-1}\sum_{p=1}^{l} T_p, \quad g = l^{-1}\sum_{p=1}^{l} A^+_{(p)} f_{(p)}. \end{aligned} \tag{17}$$

Очевидно, что предельный вектор этого итерационного процесса $u = \lim_{n\to 0} u^n$ удовлетворяет предобусловленной системе уравнений

$$\tilde{A}u = \tilde{f}, \quad \tilde{A} = \sum_{p=1}^{l} T_p, \quad \tilde{f} = \sum_{p=1}^{l} A^{+}_{(p)} f_{(p)}, \tag{18}$$

Спектр с с.п.о. матрицы $\tilde{A}$ оценивается следующим образом, см. [10].

Теорема 4. *Пусть* $0 < \alpha < 2$ *и* $0 < \rho < 1$ — *определяемые в теореме 1 величины. Тогда для собственных чисел* $\lambda(\tilde{A})$ *матрицы* $\tilde{A}$ *из* (18) *справедливы оценки* $(2-\alpha)(1-\rho)/4 \le \lambda(\tilde{A} \le \alpha l)$. Отсюда получаем следующий результат.

Теорема 5. *Для методов сопряженных направлений* (5)–(6), *примененных к СЛАУ* (18), *аддитивного проекционного алгоритма, справедлива оценка* (8) *количества итераций* $n(\varepsilon)$*, в которой число обусловленности* $æ(\tilde{A})$ *удовлетворяет неравенству* $æ \le 4\alpha l(2-\alpha)^{-1}(1-\rho)^{-1}$. Очевидно, что в реализации данного алгоритма умножение на матрицу $\tilde{A}$ соответствует одной итерации блочного метода Чиммино (17).

Замечание 1. Как следует из теорем 2 и 5, аддитивный проекционный метод сходится медленнее мультипликативного. Но аддитивные алгоритмы имеют преимущества при распараллеливании, поскольку проекции $u^{n,p}$ могут быть выполнены одновременно на разных процессорах.

Замечание 2. Используемые нами теоремы 1 и 4 в работе [10] использовались для обоснования мультипликативного и аддитивного методов декомпозиции областей. Очевидно, что теоремы 2, 3 и 5 о применении методов сопряженных и полусопряженных направлений со значительным ускорением итераций справедливы также для этих приложений.

Перспективным направлением ускорения скорости итераций, например, в методе декомпозии областей, см. [2], является использование алгоритмов в подпространствах Крылова с динамическим предобуславливанием. Обобщением рассмотренных выше методов является нестационарный итерационный процесс

$$u^{n+1} = B_n u^n + g^n = u^n + C_n^{-1}(f - Au^n), \quad B_n = I - C_n^{-1}A, \tag{19}$$

где C_n – легко обращаемые предобуславливающие матрицы. Ускорение соответствующих итераций в подпространствах $\mathcal{K}_{n+1}(r^0, C_n^{-1}A) = = span\{C_0^{-1}r^0, AC_1^{-1}r^0, ..., A^nC_n^{-1}r^0\}$ обеспечивается следующим динамически предобусловленным методом полусопряженных направлений (ДПМП-СН):

$$\begin{aligned}
&r^0 = f - Au^0, \quad p^0 = C_0^{-1}r^0, \quad n = 0, 1, ..: \\
&u^{n+1} = u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n Ap^n, \\
&p^{n+1} = C_{n+1}^{-1}r^{n+1} + \sum_{k=0}^{n-1} \beta_{n,k}p^n = p^{n+1,l} + \sum_{k=0}^{n-1} \beta_{n,k}p^n, \\
&\alpha_n = (Ar^n, r^n)/(Ap^n, Ap^n), \quad \beta_{n,k} = -(Ap^k, Ap^{n,k})/(Ap^k, Ap^k).
\end{aligned} \tag{20}$$

Алгоритм ДПМПСН обеспечивает минимизацию нормы невязки $||r^{n+1}||$ в подпространстве $\mathcal{K}_{n+1}(r^0, C_n^{-1}A)$ и выполнение равенств

$$||r^{n+1}||^2 = (r^0, r^0) - \frac{(AC_0^{-1}r^0, r^0)^2}{(Ap^0, Ap^0)} - \ldots - \frac{(AC_n^{-1}r^n, r^n)^2}{(Ap^n, Ap^n)}.$$

Таким образом, при положительной определенности матриц $C_n^{-1}A$ метод ДПМПСН сходится, однако вопрос об оценках числа итераций $n(\varepsilon)$ и их оптимизации требует дополнительных исследований. Отметим, что матрицы B_n в (19) могут быть определены, например, как произведения произвольных множителей $(I - T_k)$ из (13), только разные B_n в совокупности должны включать все строки A_i исходной матрицы A.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ N 05-01-10487, а также гранта ОМН РАН N 1.3.5.

Список литературы

[1] Golub G., Van Loan C. Matrix computations. The John Hopkins Univ. Press, Baltimore, 1989.

[2] Axelsson O. Iterative solution methods.–Cambridge Univ. Press, New York, 1994.

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

[4] Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems.–PWS Publ.: New York, 1996.

[5] Eisenstat S.C., Elman H.C., Schultz M.H. Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations. - SIAM J. Num. Anal., v.20, N 3, 1983, 345-357.

[6] Ильин В.П. Численный анализ. Ч.1. - Новосибирск, изд. ИВМиМГ СО РАН, 2004.

[7] Kaczmarz S. Angendherte Auflosung von Systemen Linearer Geichungen.–Bulletin International de l'Academic Polonaise des Sciences. Lett. Gl. Sci. Math., Nat. A, 1937, 355-357.

[8] Kaczmarz S. Approximate solution of systems of linear equations.–Int.J.Control, v. 57, N 6, 1993, 1269-1271.

[9] Ильин В.П. Об итерационном методе Качмажа и его обобщениях.–СибЖИМ, т.9, N 3, 2006, 39-49.

[10] Bramble J.H., Pasciak J.E., Wang J., Xu J. Convergence estimates for product iterative methods with applications to domain decomposition.–Math. of Comput., v. 57, N 195,1991, 1-21.

[11] Cimmino G. Calcolo approssimato per le soluzioni dei sistemi di equazioni lineari.–Ric. Sci. progr. techn.econom.naz., XVI, 1938, 326-333.

[12] Bramley R., Sameh A. Row projection methods for large nonsymmetric linear systems.– SIAM J. Sci. Stat. Comput., v.13, 1992, 168-193.

[13] Appleby G., Smolarski D.C. A linear acceleration row action method for projecting onto subspaces.–Electronic Transactions on Num. Anal., v. 20, 2005, 243-275.

И-т выч. мат. и мат. геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева,6, факс 330 66 87, т. 330-60-62, ilin@sscc.ru, Ильин Валерий Павлович