

В. П. Ильин

ИТЕРАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА–СОННЕВЕЛЬДА

§1. ВВЕДЕНИЕ

В 1980 г. в трудах симпозиума по методам решения уравнения Навье–Стокса был опубликован не привлечший вначале внимания итерационный метод [1] решения несимметричных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), основанный на поиске приближенного решения во вложенных подпространствах последовательно уменьшающейся размерности и названный алгоритмом индуцированной редукции размерности (IDR, аббревиатура от Induced Dimension Reduction). Его автор, П. Сонневельд, почти через 30 лет опубликовал совместно с М. Б. ван Гейзенем работу [2] по исследованию нового семейства методов, следующих из его старой идеи. После этого на данную тему появился цикл статей, см. например, [3–9], где некоторыми авторами было предложено название “алгоритмы в подпространствах Сонневельда”, которые даже рассматривались как альтернатива итерационным методам в подпространствах Крылова.

Следует отметить, что в 1989 г. П. Сонневельдом для решения несимметричных СЛАУ был предложен “сдвоенный” метод сопряженных градиентов CGS, являющийся вариантом алгоритма бисопряженных градиентов BiCG (см. [10, 11] и цитируемые там работы), не требующий умножения на матрицу, транспонированную к исходной (trasposed free, Conjugate Gradient Squared). Данный подход инициировал появление аналогичного стабилизированного метода бисопряженных градиентов BiCGStab [10], за которым последовали его различные обобщения, в частности, алгоритм BiCGStab(l) [12]. В отличие от широко используемого обобщенного метода минимальных невязок

Ключевые слова: итерационные методы, индуцированная редукция размерности, подпространства Сонневельда, алгоритмы полусопряженных направлений, условия дефляции, модифицированные подпространства Крылова.

Работа поддержана грантами РФФ N 15-11-10024 и РФФИ N 16-29-15122.

GMRES [10], предложенные алгоритмы (в том числе с различными видами предобуславливания) основаны на применении экономичных коротких рекурсий для вычисления последовательности невязок и других векторов, которые оказываются возможными благодаря применению их биортогонализации. Заметим также, что в работе [13] построено аналогичное семейство методов, включающее различные типы предобуславливания, получаемое при замене процесса биортогонализации на A -биортогонализацию векторов. Соответствующие алгоритмы, получившие названия A -BiCG (или BiCR, от Biconjugate Residual), A -CGS и A -BiCGStab, или CGR и BiCRStab соответственно, в экспериментах на методических примерах обнаруживают хорошую и даже несколько лучшую устойчивость, чем их прототипы с классической биортогонализацией.

В последующих статьях ([14–17] и многих других) разными авторами исследовались варианты методов $IDR(s)$, для которых установлена их связь с $BiCGStab(l)$, а также предложено их обобщение $IDRStab(s,l)$, представляющее известные алгоритмы в различных частных случаях. Эти алгоритмы стали применяться не только для решения СЛАУ, но также для нахождения собственных чисел и соответствующих собственных векторов. Формально в последнем алгоритме параметр “ s ” характеризует размерность пространства S “теневых невязок”, по отношению к которому ортогонализуются подпространства Сонневельда, а второй параметр “ l ” определяет порядок вспомогательных матричных полиномов, или соответствующих подпространств, с помощью которых минимизируется норма невязки на каждом шаге итерационного процесса.

Целью данной работы является, во-первых, дать блочное представление семейству алгоритмов $IDRStab(s,l)$ и на его основе представить их различные известные варианты в сопоставлении с современными модификациями классических итерационных процессов в подпространствах Крылова. Во-вторых, мы хотим устранить недоразумение с противопоставлением алгоритмов в подпространствах Крылова и Сонневельда на примере рассмотрения предлагаемого семейства методов MPSCD (Multi-Preconditioned Semi-Conjugate Direction),

в которых используются три следующих подхода. Первый из них заключается в возможном использовании для построения данных алгоритмов A -биортогонализации наряду с классической биортогонализацией, а второй – в применении мультипредобусловленных алгоритмов полусопряженных направлений (в частном случае, невязок SCR, Semi-Conjugate Residual, см. [18–19]), являющихся развитием рассмотренных в [20, 21] методов для реализации матричных многочленов, минимизирующих норму вектора невязки.

Другой принципиальный момент рассматриваемых методов MP-SCD заключается в использовании на каждой крыловской итерации процесса ортогонализации векторов невязок к заранее определяемому “дефляционному” подпространству, которое фактически является аналогом подпространства “теневых невязок” \mathcal{S} в методах IDR. Идея дефляции (deflation) итерационных крыловских процессов была впервые предложена Р. Николайдесом в работе [22] 1987 г., а потом активно развивалась в различных направлениях (совершенно независимо от методов индуцированной редукции размерности) под названиями методов агрегации, дополнения (augmentation), грубосеточной коррекции и малоранговых аппроксимаций исходных матриц, см. обзоры литературы в [23–27].

Третий аспект рассматриваемых алгоритмов заключается в использовании на каждой итерации нескольких предобуславливающих матриц, что для методов сопряженных градиентов было впервые предложено Р. Бридсоном и К. Грейфом в работе [28]. Отметим при этом, что процедура дефляции, или агрегации, в данной трактовке интерпретируется как использование дополнительного предобуславливателя специального типа.

Данная работа организована следующим образом. В §2 мы даем обобщенное блочное представление и краткий обзор методов индуцированной редукции размерности с акцентом на их естественную интерпретацию как специальных алгоритмов в подпространствах Крылова. В §3 рассмотрены мульти-предобусловленные методы полусопряженных направлений MPSCD, обладающие рядом свойств алгоритмов в “сжимающихся” подпространствах Сонневельда, но на базе “классических” модифицированных крыловских процессов с дефляцией, а в заключении приводится обсуждение полученных результатов.

§2. БЛОЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МЕТОДОВ IDRSTAB (S,L)

Пусть требуется решить некоторым итерационным методом невырожденную вещественную систему линейных алгебраических уравнений

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

при начальном приближении u^0 и векторе начальной невязки $r^0 = f - Au^0$. В данном параграфе мы делаем акцент только на свойства методов индуцированного понижения размерности, не останавливаясь на возможностях применения различного типа предобуславливания СЛАУ. В частности, матрица A в (1) может считаться уже предобусловленной, что не меняет наших дальнейших рассуждений.

Пусть также даны два векторных пространства \mathcal{G}_0 и \mathcal{S} , которые не содержат общих нетривиальных инвариантных подпространств матрицы A и определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0 &= \mathcal{K}_N(A, g_1) = \text{Span}(g_1, Ag_1, \dots, A^{N-1}g_1), \quad g_1 \in \mathcal{R}^N, g_1 \neq 0, \\ \mathcal{S} &= \mathcal{N}(\tilde{R}^T), \quad \tilde{R} = (\tilde{r}_1 \tilde{r}_2 \dots \tilde{r}_s) \in \mathcal{R}^{N,s}, \quad \tilde{r}_k \in \mathcal{R}^N, k = 1, \dots, s. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь g_1 – некоторый ненулевой вектор, \mathcal{K}_N – полное пространство Крылова, \mathcal{S} – левое нуль-пространство заданной прямоугольной матрицы полного ранга \tilde{R} , $s \ll N$, столбцы \tilde{r}_k которой являются базисом \mathcal{S} и называются векторами начальных теневых невязок, а индекс “ T ” означает транспонирование. Другими словами, если какой-то вектор g принадлежит \mathcal{S} , то он ортогонален всем \tilde{r}_k ($g \perp \tilde{r}_k$, или $(g, \tilde{r}_k) = 0$, $k = 1, \dots, s$), что можно записать также в виде $\mathcal{S} = \tilde{R}^\perp$.

Сделанное относительно подпространств из (2) предположение означает, например, что никакой собственный вектор матрицы A не может принадлежать одновременно \mathcal{G}_0 и \mathcal{S} , т.е. любой собственный вектор из \mathcal{G}_0 ортогонален всем столбцам матрицы \tilde{R} .

Рассмотрим теперь матричные полиномы вида

$$P_{l_n}(A) = \prod_{k=1}^{l_n} (\mu_k I - A), \quad l_n \ll N, \quad (3)$$

где I – единичная матрица, l_n – степени соответствующих многочленов, а μ_k – некоторые вещественные числа, или параметры спектрального сдвига матрицы, о выборе которых будет сказано позже.

Построим последовательность подпространств, называемых подпространствами Сонневельда:

$$\mathcal{G}_n = P_{l_n}(A)(\mathcal{G}_{n-1} \cap \mathcal{S}), \quad (4)$$

размерность которых будем обозначать через d_n . Свойства этих вложенных подпространств лежат в основе рассматриваемых далее итерационных методов, а ожидают они на так называемой IDR-теореме, доказанной при $l_n = 1$ в [2], а при фиксированном $l_n = \ell > 1$ – в работе [6].

Теорема 1. Пусть $A \in \mathcal{R}^{N,N}$ и $\tilde{R} \in \mathcal{R}^{N,s}$ суть невырожденная и ранга s матрицы соответственно, \mathcal{G}_0 и \mathcal{S} – определенные в (2) подпространства, не содержащие собственных векторов матрицы A , а $P_{l_n}(A)$ – многочлен вида (3) порядка $l_n < s$. Тогда для подпространств Сонневельда (4) выполняются условия вложенности $\mathcal{G}_n \subseteq \mathcal{G}_{n-1}$, если $\mathcal{G}_{n-1} \neq \{0\}$, а для их размерностей справедливы условия монотонного невозрастания разностей $d_n - d_{n+1}$:

$$0 \leq d_n - d_{n+1} \leq d_{n+1} - d_{n+2} \leq s. \quad (5)$$

Замечание 1. Последовательность подпространств является сжимающейся и конечной, т.е. $\mathcal{G}_n \subset \mathcal{G}_{n-1}$ и $d_n < d_{n-1}$, если только $\mathcal{G}_{n-1} \neq \{0\}$. Если при $0 < n < N$ справедливо $\mathcal{G}_n = \mathcal{G}_{n-1} \neq \{0\}$, то $\mathcal{G}_{n-1} \cap \mathcal{S}$ содержит собственный вектор матрицы A . Фактически вместо \mathcal{G}_0 вида (2) можно взять любое линейное подпространство, инвариантное относительно умножения на A , т.е. такое, что $A\mathcal{G}_0 \subset \mathcal{G}_0$.

Замечание 2. Пространства Сонневельда \mathcal{G}_n , как показано в [4], могут быть представлены с помощью специальных блочных подпространств Крылова, которые, естественно, являются расширяющимися с ростом n :

$$\mathcal{K}_n(A^T, \tilde{R}) = \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} (A^T)^k \tilde{R} \bar{c}_k \mid \bar{c}_k \in \mathcal{R}^s \right\}, \quad (6)$$

где \bar{c}_k суть векторы коэффициентов, образующих линейные комбинации столбцов матрицы \tilde{R} и определяемых далее из условия ортогонализации. Действительно, согласно (2)–(4), при $n = 1$ мы имеем

$$\mathcal{G}_n = \{P_{l_n}(A)g \mid P_{l_n}(A)g \perp \tilde{R} \in \mathcal{K}_n(A^T, \tilde{R})\}. \quad (7)$$

Однако условие ортогональности $P_{l_n}(A)g \perp \tilde{R}$ может выполняться, если и только если $A^k g \perp \tilde{R}$ при всех $k \leq l_n$, что эквивалентно соотношению $g \perp (A^T)^k \tilde{R}$. Отсюда по индукции получаем представление

$$\mathcal{G}_n = \{P_{l_n}(A)g \mid g \perp \mathcal{K}_n(A^T, \tilde{R})\}, \quad (8)$$

смысл которого заключается в том, что каждой расширяющейся последовательности блочных подпространств Крылова можно сопоставить последовательность сжимающихся подпространств Сонневельда.

Рассмотренные предварительные геометрические представления о подпространствах Сонневельда позволяют построить общую схему итерационного процесса, в котором векторы невязок последовательных приближений $r^n = f - Au^n$ будут находиться в \mathcal{G}_n . Если векторы u^{n-1} и $r^{n-1} \in \mathcal{G}_{n-1}$ известны, то одну итерацию метода IDRStab(s,l) можно представить двумя этапами, на которых соответственно находятся векторы

$$r^{n-1/2} \in \mathcal{G}_{n-1} \cap \mathcal{S}, \quad r^n = P_{l_n}(A)r^{n-1/2}. \quad (9)$$

Здесь первая стадия включает ортогонализацию невязки r^{n-1} к векторам теневых невязок \tilde{r}_k , а вторая отвечает, например, за минимизацию r^n . Отметим, что классический алгоритм BiCGStab соответствует случаю $s = l = 1$. Этап ортогонализации может быть выполнен рутинно с помощью устойчивого модифицированного метода Грама–Шмидта. С этой целью, в соответствии с (9), для нахождения вектора $r^{n-1/2} \in \mathcal{G}_{n-1} \cap \mathcal{S}$ на этапе инициализации при $n = 0$ найдем $s + 1$ вектор $g_{-s}, \dots, g_0 \in \mathcal{G}_0 = \mathcal{K}_N(A, g_1)$. Предполагая, что это уже сделано, используем представление

$$r^{-1/2} = g_0 - \sum_{k=-s}^{-1} g_k c_k,$$

где неизвестные коэффициенты c_k определяются из условия ортогонализации

$$\tilde{R}^T r^{-1/2} = 0, \quad \tilde{R} \in \mathcal{R}^{N,s}, \quad (10)$$

которое дает систему s линейных уравнений

$$C c = R^T G c = R^T g_0, \quad G = (g_{-1} \cdots g_{-s}) \in \mathcal{R}^{N,s}, \quad c = \{c_k\} \in \mathcal{R}^s, \quad (11)$$

имеющую единственное решение, если матрица $C = R^T G \in \mathcal{R}^{s,s}$ невырожденная.

Замечание 3. Вычисление вектора c по условию ортогонализации (10) фактически представляет собой решение задачи минимальных квадратов [29]. Её нормальное решение (минимальное по норме) можно вычислять и непосредственно из переопределенной системы $Gc = g_0$ с прямоугольной матрицей G . Отметим, что если матрица G или C вырождена, то целесообразно применять обобщенные обратные матрицы или, например, сингулярное разложение матриц (SVD).

Для решения СЛАУ (11) надо предварительно вычислить s векторов $g_k \in \mathcal{K}_N(A, g_1)$, для чего можно применить любой из приемлемых алгоритмов в подпространствах Крылова. Наиболее часто используемый здесь путь – это выбор $g_0 = r^0$ и вычисление последующих g_k с помощью процесса ортогонализации Арнольди для векторов $A^k g_0$.

Дальнейшим этапом алгоритма является нахождение вектора $r^1 = P_{l_1}(A)r^{-1/2} \in \mathcal{G}_1$. Умножение на матричный полином от A осуществляется после определения параметров сдвига μ_k в (3), на чем мы остановимся позже. После завершения первой итерации второй шаг начинается с реализации условия ортогонализации (11). Далее вычислительный процесс продолжается аналогичным образом, и в целом он может быть представлен определенной ниже последовательностью действий. Отметим, что при этом фактически выполняется двухуровневый итерационный алгоритм, в котором верхний уровень относится к последовательности подпространств Сонневельда, занумерованных индексом n , а нижний уровень – это реализация внутренних итераций в подпространствах Крылова.

Итак, в целом для каждого $n = 1, 2, \dots$ осуществляются два типа операций, представленных в (9), причем мы их поменяем местами, что не искажает сути алгоритма.

- а. Выполняется умножение вектора невязки r^{n-1} из предыдущего подпространства Сонневельда на многочлен $P_{l_n}(A)$:

$$\hat{r}^n = P_{l_n}(A)r^{n-1}, \quad r^{n-1} \in \mathcal{G}_{n-1} \cap \mathcal{S}.$$

- б. Решается система уравнений относительно коэффициентов c_k , обеспечивающих условие ортогональности:

$$R^T r^n = 0, \quad r^n = \hat{r}^n - \sum_{k=-s}^{-1} g_k c_k = \hat{r} - Gc.$$

Количество базисных векторов $g_k \in \mathcal{G}_n$ можно было бы брать и не равным s , рассматривая решения получаемых уравнений в обобщенном смысле, т.е. как задачи наименьших квадратов, но на этих моментах мы останавливаться не будем.

Заметим, что здесь и в дальнейшем используется блочное, отличное от принятого в цитируемых работах, представление итерационного процесса, когда вся процедура ортогонализации вычисляемой невязки ко всем столбцам матрицы \tilde{R} включается в одну итерацию.

Другие вопросы характеристики методов индуцированной редукции размерности – это выбор матрицы теневых невязок \tilde{R} , алгоритма инициализации самого процесса, т.е. определение подпространства \mathcal{G}_0 и способа вычисления $r^0 \in \mathcal{G}_0$, а также методов нахождения последующих векторов невязок $r^n \in \mathcal{G}_n$. Во всех рассматриваемых ниже алгоритмах мы естественным образом полагаем, что критерием окончания итерационного процесса является выполнение условия

$$\|r^{n(\varepsilon)}\| \leq \varepsilon \|f\|, \quad \varepsilon \ll 1, \quad \|f\|^2 = (f, f). \quad (12)$$

Замечание 4. Как отмечено в [6], методы IDR(s,1) относятся к классу алгоритмов Петрова–Галеркина в следующем смысле. Пусть векторы $u^n - u^0$ и r^n принадлежат подпространствам Крылова \mathcal{K}_n и $\mathcal{K}_{n+1}(A, r^0)$ соответственно (если степень минимального полинома матрицы $P_n(A)$ равна $n = N$, то $\mathcal{K}_N = \mathcal{R}^N$). Тогда метод Петрова–Галеркина относительно последовательности вложенных подпространств $\{\mathcal{L}_m\}$ определяется по условию ортогональности невязки r^n подпространству \mathcal{L}_m размерности m , т.е. $r^n \perp \mathcal{L}_m^\perp$, или $r^n \in \mathcal{L}_m^\perp$. В частности, если $\mathcal{L}_m = A\mathcal{K}_n$, то в данную схему укладывается метод GMRES. Поскольку $\mathcal{R}^N = \mathcal{K}_{n+1} \oplus \mathcal{K}_{n+1}^\perp$, а с ростом n размерности подпространств \mathcal{K}_{n+1} и \mathcal{K}_{n+1}^\perp растут и убывают соответственно, то ортогональное дополнение к подпространству Крылова \mathcal{K}_{n+1}^\perp , в некотором смысле, играет роль подпространства Сонневельда.

Приведенные в списке литературы статьи, а также цитируемые в них работы содержат достаточно обширные обзоры и существующие интерпретации разнообразных алгоритмов IDR, которые свидетельствуют о еще не вполне устоявшейся методологии данного класса итерационных процессов.

§3. МУЛЬТИ-ПРЕДОБУСЛОВЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОЛУСОПРЯЖЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ

В данном параграфе мы рассмотрим возможность применения какого-то из блочных методов полусопряженных направлений [18, 19], являющихся развитием алгоритма обобщенных сопряженных невязок GCR (Generalized Conjugate Residual, [20]).

Полагая в (2) $g_1 = r^0$, предлагаемое семейство методов MPSCD в подпространствах Крылова $\mathcal{K}_m(A, r^0)$ запишем, следуя [18], в виде

$$u^{m+1} = u^m + P_m \bar{\alpha}_m, \quad r^{m+1} = r^m - AP_m \bar{\alpha}_m, \quad m = 0, 1, \dots, \quad (13)$$

где $P_m = (p_1^m \dots p_{M_m}^m) \in \mathcal{R}^{N, M_m}$ есть составленная из направляющих векторов p_k^m матрица, а $\bar{\alpha}_m = (\alpha_{m,1} \dots \alpha_{m, M_m})^T$ – вектор итерационных параметров, которые определяются из свойств ортогональности

$$\begin{aligned} (Ap_k^m, A^\gamma p_{k'}^{m'}) &= \rho_{m,k}^{(\gamma)} \delta_{m,m'}^{k,k'}, \quad \rho_{m,k}^{(\gamma)} = (Ap_k^m, A^\gamma p_k^m), \\ \gamma &= 0, 1; \quad m' = 0, 1, \dots, m-1; \quad k, k' = 1, 2, \dots, M_m. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь $\delta_{m,m'}^{k,k'}$ – символ Кронекера, равный единице при $m = m', k = k'$ и нулю в противном случае, а значения $\gamma = 0, 1$ определяют в дальнейшем соответственно метод полусопряженных градиентов или полусопряженных невязок. Отметим, что в отличие от обычных методов полусопряженных направлений в формулах (3) на каждой m -й итерации используется не один, а M_m направляющих векторов, количество которых на разных итерациях может, вообще говоря, меняться.

Векторы коэффициентов $\bar{\alpha}_m = \{\alpha_{m,l}^{(\gamma)}\}$ в (13) для $\gamma = 0, 1$ при выполнении (14) определяются из условия экстремума

$$\partial \Phi_m^{(\gamma)} / \partial \alpha_{m,l} = 0, \quad \Phi_m^{(\gamma)}(r^{m+1}) \equiv (r^{m+1}, A^{\gamma-1} r^{m+1}), \quad (15)$$

по формулам

$$\alpha_{m,l}^{(\gamma)} = (A^\gamma B_{m,l}^{-1} r^m, r^m) / \rho_{m,l}^{(\gamma)}. \quad (16)$$

Направляющие векторы p_l^m определяются из условий ортогональности (14) при $\gamma = 0, 1$ в следующем блочном виде:

$$\begin{aligned} P_0 &= \{p_l^0 = B_{0,l}^{-1} r^0\}, \\ P_{m+1} &= P_{m+1,0} - \sum_{k=0}^m P_k \bar{\beta}_{m,k}^{(\gamma)} \\ &= \left\{ p_l^{m+1} = B_{m+1,l}^{-1} r^{m+1} - \sum_{k=0}^m \sum_{l=1}^{M_k} \beta_{m,k,l}^{(\gamma)} p_l^k \right\}, \\ m &= 0, 1, \dots; \quad B_{m,l} \in \mathcal{R}^{N,N}, \quad l = 1, \dots, M_m, \quad \gamma = 0, 1. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь $\bar{\beta}_{m,k}^{(\gamma)} = \{\beta_{m,k,l}^{(\gamma)}\} = (\beta_{m,k,1}^{(\gamma)} \dots \beta_{m,k,M_m}^{(\gamma)})^T \in \mathcal{R}^{M_m}$ суть векторы коэффициентов, а $B_{m,l} \in \mathcal{R}^{N,N}$ – предобуславливающие матрицы, которые выбираются из соображений невырожденности, легкой обратимости и эффективного ускорения конструируемых итерационных процессов. Отметим, что рассматриваемые “предобуславливатели” $B_{m,l}$ являются динамическими, или гибкими (flexible, как в методах FGM-RES, [10]), поскольку они для каждого l зависят от номера итерации m .

Подставляя выражения (17) в условия ортогональности (14), мы получаем формулы для коэффициентов

$$\begin{aligned} \beta_{m,k,l}^{(\gamma)} &= (A^\gamma p_l^k, AB_{m+1,l}^{-1} r^{m+1}) / \rho_{m,l}^{(\gamma)} = (A^\gamma p_l^k, A p_l^{m,k}) / \rho_{m,l}^{(\gamma)}, \\ m &= 0, 1, \dots; \quad k = 0, \dots, m; \quad l = 1, \dots, M_m, \end{aligned} \quad (18)$$

в которых векторы $p_l^{m,k}$ определяются из соотношений

$$\begin{aligned} p_l^{m,k} &= p_l^{m,k-1} - \beta_{m,k-1,l}^{(\gamma)} p_l^{k-1} \\ &= B_{m+1,l}^{-1} r^{m+1} - \sum_{i=0}^{k-1} \beta_{m,i,l}^{(\gamma)} p_l^i, \quad l = 1, \dots, M_m, \\ k &= 0, 1, \dots, m+1; \quad p_l^{m,0} = B_{m+1,l}^{-1} r^{m+1}, \quad p_l^{m,m+1} = p_l^{m+1}, \end{aligned} \quad (19)$$

на основе модифицированного метода Грама–Шмидта.

Справедливо следующее утверждение (см. доказательство в [18, 19]).

Теорема 2. Для итерационного процесса MPSCD, определяемого соотношениями (13), (16)–(19) при $\gamma = 0, 1$ и невырожденности матриц $A, B_{m,l}$ выполняются следующие соотношения:

- направляющие векторы r_k^m удовлетворяют условиям ортогональности (14);
- векторы невязок r^m являются обобщенно полусопряженными, т.е.

$$(A^\gamma B_{k,l}^{-1} r^m, r^k) = \begin{cases} 0, & k < m, \\ \sigma_m^{(\gamma)} = (A^\gamma B_{m,l}^{-1} r^m, r^m), & k = m; \end{cases} \quad (20)$$

- функционалы $\Phi_m^{(\gamma)}(r^{m+1})$ удовлетворяют условиям экстремальности (15), и при этом для любых $q = 0, 1, \dots, m$ справедливы соотношения

$$\Phi_m^{(\gamma)}(r^{m+1}) = \Phi_q^{(\gamma)}(r^q) - \sum_{k=q}^m \sum_{l=1}^{M_m} (A^\gamma B_{q,l}^{-1} r^q, r^q)^2 / \rho_{k,l}^{(\gamma)}. \quad (21)$$

Замечание 5. При $\gamma = 1$ или при условии симметричности матрицы A в методе MPSCD обеспечивается минимальность нормы $\|r^{m+1}\| = (r^{m+1}, r^{m+1})^{1/2}$ в “мульти-предобусловленном” подпространстве Крылова

$$\mathcal{K}_{\Sigma_{m+1}}(r^0, A) = \text{Span} \left\{ B_{0,1}^{-1} r^0, \dots, B_{0,M_0}^{-1} r^0, \right. \\ \left. AB_{1,1}^{-1} r^1, \dots, AB_{1,M_1}^{-1} r^1, \dots, A^m B_{m,1}^{-1} r^m, \dots, A^m B_{m,M_m}^{-1} r^m \right\}, \quad (22)$$

размерность которого равна $\sum_{m+1} = M_0 + \dots + M_m$. В методах полусопряженных градиентов, т.е. при $\gamma = 0$, функционал $\Phi_m^{(0)}(r^{m+1}) = (A^{-1} r^{m+1}, r^{m+1})$ для несимметричной матрицы A своего минимума в подпространстве Крылова, вообще говоря, не достигает.

В рассмотренных блочных методах полусопряженных направлений используются так называемые “длинные” рекурсии, т.е. необходимо хранить все вычисленные на предыдущих итерациях направляющие векторы или составленные из них матрицы P_1, \dots, P_m . Во избежание слишком больших требований к памяти при этом мы будем использовать известную процедуру рестартов, заключающуюся в том, что через какое-то количество итераций вектор невязки определяется не из обычных рекурсий (13), а из исходного уравнения, и крыловский процесс как бы формируется заново, но с текущего приближения для искомого вектора.

Для ускорения получаемого итерационного процесса на каждом из рестартов, которые далее нумеруются индексом n , мы будем осуществлять ортогонализацию вектора невязки подпространству, аналогичному \mathcal{S} из (2), однако эту процедуру выполняем не традиционным для методов IDR способом, а с помощью известного приема дефляции, или агрегации, см. [24] и цитируемые там работы. В этом случае, по некоторой прямоугольной матрице $\tilde{R}_n = (\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{s_n})^T \in \mathcal{R}^{N, s_n}$, $s_n \ll N$, фактически формируется дополнительная предобуславливающая матрица

$$B_{n,0}^{-1} = \tilde{R}_n (\hat{A}_n)^{-1} \tilde{R}_n^T, \quad \hat{A}_n = \tilde{R}_n^T A \tilde{R}_n \in \mathcal{R}^{s_n, s_n}, \quad (23)$$

где $B_{n,0}^{-1}$ является малоранговой аппроксимацией матрицы A^{-1} , обратной к исходной. Она оказывается невырожденной, если таковой является A , а матрица дефляции \tilde{R}_n имеет полный ранг s_n . Здесь для формальной общности мы допускаем зависимость подпространств \mathcal{S}_n и их размерностей s_n от номера рестарта n . Обозначая через m_n номер итерации ($m_0 = 0$) метода MPSCD вида (13), включающей выполнение рестарта и ортогонализации, получаемый алгоритм для $n = 0$ можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} u^0 &= u^{-1} + B_{0,0}^{-1} r^{-1}, \quad r^{-1} = f - Au^{-1}, \\ r^0 &= f - Au^0, \quad p_l^0 = (I - B_{0,0}^{-1} A) B_{0,l}^{-1} r^0, \quad l = 1, \dots, M_0. \end{aligned} \quad (24)$$

В данном случае, через u^{-1} обозначено произвольное начальное приближение искомого вектора, а u^0 – его “подправленное” значение. Легко проверить, что формулы (24) обеспечивают выполнение условий

$$\tilde{R}_0^T r^0 = 0, \quad \tilde{R}_0^T A P_0 = 0, \quad (25)$$

где матрица P_0 состоит из M_0 столбцов p_l^0 , определяемых в (24).

Отметим, что реализация формул (24) проводится относительно легко, так как умножение на матрицу $B_{0,0}^{-1} \in \mathcal{R}^{N, N}$ содержит решение вспомогательной СЛАУ с матрицей малой размерности $\hat{A}_0 = \tilde{R}_0^T A \tilde{R}_0 \in \mathcal{R}^{s_0, s_0}$. Еще заметим, что в формулах (23) мы специально сохранили обозначения для матрицы \tilde{R}_n , чтобы подчеркнуть аналогию с методами в подпространствах Сонневельда из §2.

Для определения линейно независимых столбцов \tilde{r}_k , $k = 1, \dots, s_n$, матрицы \tilde{R}_n можно использовать простейшие “кусочно-постоянные” базисные векторы. Для этого разобьем множество индексов $\Omega : i =$

$1, \dots, N$ на примерно равные непересекающиеся подмножества $\Omega_k^{(n)}$ (эти декомпозиции можно делать разными на различных итерациях), полагая $\tilde{r}_k(i) = 1$ при $i \in \Omega_k^{(n)}$ и $\tilde{r}_k(i) = 0$ при $i \notin \Omega_k^{(n)}$, $k = i, \dots, s_n$. Отметим, что базисные векторы \tilde{r}_k возможно определять и более “гладкими”, как это сделано в [26]. В некоторых работах столбцы матрицы \tilde{R}_n выбираются случайным образом или с помощью решения вспомогательных собственных проблем. В целом вопросы построения наиболее информативного базиса – это тема для специальных исследований.

Если на каждом из последующих рестартов известно итерационное приближение u^{m_n-1} , то формулы (24), (25) изменяются очевидным образом:

$$\begin{aligned} u^{m_n} &= u^{m_n-1} + B_{m_n,0}^{-1} r^{m_n-1}, \quad r^{m_n-1} = f - Au^{m_n-1}, \\ r^{m_n} &= f - Au^{m_n}, \quad p_l^{m_n} = (I - B_{m_n,0}^{-1}A)B_{m_n,l}^{-1}r^{m_n}. \end{aligned} \quad (26)$$

В данном случае, предобуславливатели $B_{m_n,l}$ определяются формулами (23) с заменой индекса n на m_n , а условия ортогональности (25) заменяются на аналогичные:

$$\tilde{R}_{m_n}^T r^{m_n} = 0, \quad \tilde{R}_{m_n}^T AP_{m_n} = 0. \quad (27)$$

Замечание 6. Отметим непосредственно проверяемые равенства

$$(C_1^{(n)})^2 \equiv (B_{m_n,0}^{-1}A)^2 = C_1^{(n)}, \quad (C_2^{(n)})^2 \equiv (I - B_{m_n,0}^{-1}A)^2 = C_2^{(n)},$$

означающие, что матрицы $C_1^{(n)}$ и $C_2^{(n)}$ являются проекторами.

Чтобы обеспечить выполнение условий ортогональности не только в точках рестарта, а на каждой итерации, формулы (17) для направляющих векторов в методах MPSCD при $m \neq m_n$ надо заменить на следующие:

$$\begin{aligned} p_l^{m+1} &= \tilde{B}_{m+1,l}^{-1} r^{m+1} - \sum_{k=0}^m \sum_{l=1}^{M_k} \beta_{m,k,l}^{(\gamma)} p_l^k, \\ \tilde{B}_{m+1,l}^{-1} &= (I - B_{m+1,0}^{-1}A)B_{m+1,l}^{-1}, \quad l = 1, \dots, M_m, \\ m &= m_{n-1}, \quad m_{n-1} + 1, \dots, m_n - 1. \end{aligned} \quad (28)$$

В этом случае, как легко убедиться непосредственной проверкой по индукции, справедливы соотношения

$$\tilde{R}_m^T r^m = 0, \quad \tilde{R}_m^T AP_m = 0, \quad m = 0, 1, \dots \quad (29)$$

Однако здесь надо иметь в виду, что выражения (28), формально отличающиеся от (17) только видом предобуславливающих матриц ($\tilde{B}_{m+1,l}^{-1}$ вместо $B_{m+1,l}^{-1}$), именно в силу этого различия требуют для сохранения обязательных условий ортогональности направляющих векторов (14) изменения формул для определения рекуррентных коэффициентов $\beta_{m,k,l}^{(\gamma)}$: в соотношениях (18)–(19) матрицы $B_{m+1,l}^{-1}$ надо заменить на $\tilde{B}_{m+1,l}^{-1}$.

Как известно из теоретических оценок и экспериментальных расчетов, процедуры рестартов приводят к понижению размерностей используемых крыловских подпространств, а как следствие – к снижению скорости сходимости итерационного процесса. Однако это является неизбежной платой за экономию памяти для всех алгоритмов с короткими рекурсиями.

В рассмотренных нами методах MPSCD с дефляционными рестартами номера соответствующих итераций m_n проще всего брать через равные интервалы, т.е. $m_n = m_{n-1} + \varrho$ с каким-то априорным значением целого ϱ . С другой стороны, возможна постановка вопроса и об управлении выбором значений m_n по какой-то апостериорной информации.

Замечание 7. Как указано в замечании 4, каждой последовательности \mathcal{K}_{n+1} подпространств Крылова, размерности которых увеличиваются с ростом n , соответствует последовательность “сжимающихся” подпространств – ортогональных дополнений \mathcal{K}_{n+1}^\perp в полном пространстве \mathcal{R}^N . Нетрудно видеть, что при модификациях крыловских подпространств, заключающихся в дополнительной ортогонализации вычисляемых векторов по отношению к “пробному” подпространству \mathcal{S} , соотношения двойственности принципиально не меняются. Условия ортогональности вида (25), (27) и (29) естественным образом позволяют определить для алгоритмов MPSCD подпространства с понижающимися размерностями, аналогичные \mathcal{G}_n в методах IDR.

Альтернативой к стратегии рестартов для экономии памяти и сокращения длины рекурсии является подход с ограниченной ортогональностью в том смысле, что при построении итераций для решения несимметричных СЛАУ в подпространствах Крылова хранятся и используются в расчетах только несколько последних направляющих векторов. Если количество таких векторов постоянно и равно $q + 1$,

то формулы (28) надо заменить на следующие:

$$p_l^{m+1} = \tilde{B}_{m+1,l}^{-1} r^{m+1} - \sum_{k=m-q}^m \sum_{l=1}^{M_k} \beta_{m,k,l}^{(\gamma)} p_l^k, \quad m = 0, 1, \dots \quad (30)$$

Если при этом p_l^0 вычисляется по формулам (24), то свойства ортогональности (29) также выполняются. Реализацию процесса дополнительной ортогонализации в данном подходе можно осуществлять с помощью метода агрегации или дефляции.

§4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Целью данной работы является, в определенном смысле, развенчание мифа об исключительности методов индуцированной редукции размерности, которые в ряде работ по недоразумению противопоставляются классическим итерационным процессам в подпространствах Крылова. На примере предложенных нами мульти-предобусловленных алгоритмов полусопряженных невязок также показано, что модифицированные методы крыловского типа с использованием дополнительных процедур ортогонализации (дефляции, агрегации и других) естественным образом могут ассоциироваться с подпространствами понижающейся размерности, называемых некоторыми авторами подпространствами Сонневельда. При этом между подпространствами “теневых невязок” в алгоритмах IDR и дефляционными подпространствами в “классических” крыловских методах, а также в способах их использования для ускорения итераций существует достаточно близкая аналогия, которая авторами разных исследований никак не отмечалась. Более того, удивительно, что в публикациях по двум рассмотренным нами подходам практически отсутствуют перекрестные ссылки, хотя речь идет о близких направлениях вычислительной алгебры. В целом же активно ведущиеся обсуждения различных приемов оптимизации итерационных процессов свидетельствуют об актуальности и перспективности вопросов развития методов в подпространствах Крылова.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Wesseling, P. Sonneveld, *Numerical experiments with a multiple grid and a preconditioned Lanczos type method.* — Lect. Notes Math. **771** (1980), 543–562.

2. P. Sonneveld, M. B. Van Gijzen, *IDR(s): a family of simple and fast algorithms for solving large nonsymmetric systems of linear equations*. — SIAM J. Sci. Comput. **31**, No. 2 (2008/09), 1035–1062.
3. G. L. Sleijpen, M. B. Van Gijzen, *Exploiting BiCGStab(l) strategies to induce dimension reduction*. — SIAM J. Sci. Comput. **32**, No. 5 (2010), 2687–2709.
4. M. H. Gutknecht, *IDR explained*. — Electron. Trans. Numer. Anal. **36** (2009/10), 126–148.
5. Y. Onoue, S. Fujino, N. Nakashima, *An overview of a family of new iterative methods based on IDR theorem and its estimation*, in: Proceedings of the International Multi-Conference of Engineers and Computer Scientists 2009, vol. 11, IMECS 2009, Hong Kong, 2009, 2129–2134.
6. V. Simoncini, D. B. Szyld, *Interpreting IDR as a Petrov–Galerkin method*. — SIAM J. Sci. Comput. **32**, No. 4 (2010), 1898–1912.
7. M. Tanio, M. Sugihara, *GBi-CGSTAB(s,l): IDR(s) with higher-order stabilization polynomials*. — J. Comput. Appl. Math. **235**, No. 3 (2010), 765–784.
8. G. L. Sleijpen, P. Sonneveld, M. B. Van Gijzen, *Bi-CGStab as an induced dimension reduction method*. — Appl. Numer. Math. **60**, No. 11 (2010), 1100–1114.
9. P. Sonneveld, *On the convergence behavior of IDR(s) and related methods*. — SIAM J. Sci. Comput. **34**, No. 5 (2012), 2576–2598.
10. Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems (Second edition)*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
11. В. П. Ильин, *Методы и технологии конечных элементов*. Новосибирск: Изд. ИВМиМГ СО РАН, 2007.
12. G. L. Sleijpen, D. R. Fokkema, *BiCGStab(l) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum*. — Electron. Trans. Numer. Anal. **1** (1993), 11–32.
13. В. П. Ильин, *Методы бисопряженных направлений в подпространствах Крылова*. — СибЖИМ, **11**, №. 4 (36) (2008), 47–60.
14. M. B. Van Gijzen, G. I. Sleijpen, J.-P. Zemke, *Flexible and multi-shift induced dimension reduction algorithms for solving large sparse linear systems*. — Numer. Linear Algebra Appl. **22** (2014), 1–25.
15. M. B. Van Gijzen, P. Sonneveld, *Algorithm 913: an elegant IDR(s) variant that efficiently exploits biorthogonality properties*. — ACM Trans. Math. Software **38**, No. 1 (2011), 5.1–5.19.
16. O. Rendel, A. Rizvanolli, J.-P. Zemke, *IDR: A new generation of Krylov subspace methods*. — Linear Algebra Appl. **439**, No. 4 (2013), 1040–1061.
17. R. Astudillo, M. B. Van Gijzen, *A restarted induced dimension reduction method to approximate eigenpairs of large unsymmetric matrices*. — J. Comput. Appl. Math. **296** (2016), 24–35.
18. V. P. Il'in, *Methods of semiconjugate directions*. — Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling **23**, No. 4 (2008), 369–387.
19. V. P. Il'in, E. A. Itskovich, *On the semi-conjugate direction methods with dynamic preconditioning*. — J. Appl. Ind. Math. **3**, No. 2 (2009), 222–233.
20. S. C. Eisenstat, H. C. Elman, M. H. Schultz, *Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations*. — SIAM J. Numer. Anal. **20**, No. 3 (1983), 345–357.

21. J. Y. Yuan, G. H. Golub, R. J. Plemmons, W. A. Cecilio, *Semi-conjugate direction methods for real positive definite systems*. — ВИТ **44**, No. 1 (2004), 189–207.
22. R. Nicolaides, *Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems*. — SIAM J. Numer. Anal. **24** (1987), 355–365.
23. Л. Ю. Колотилина, *Переобуславливание систем линейных алгебраических уравнений с помощью двойного исчерпывания. I. Теория*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **229** (1995), 95–152.
24. O. Coulaud, L. Giraud, P. Ramet, X. Vasseur, *Deflation and augmentation techniques in Krylov subspace methods for the solution of linear systems*. Inria, Bordeaux Sud-Ouest, France, Research Report No. 8265 (2013).
25. M. H. Gutknecht, *Deflated and augmented Krylov subspace methods: A framework for deflated BICG and related solvers*. — SIAM J. Matrix Anal. Appl. **35**, No. 4 (2014), 1444–1466.
26. Я. Л. Гурьева, В. П. Ильин, *О некоторых параллельных методах и технологиях декомпозиции областей*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **428** (2014), 89–106.
27. В. П. Ильин, *О проблемах параллельного решения больших СЛАУ*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **439** (2015), 112–127.
28. R. Bridson, C. Greif, *A multipreconditioned conjugate gradient algorithm*. — SIAM J. Matrix Anal. Appl. **27**, No. 4 (2006), 1056–1068.
29. Ч. Лоусон, Р. Хенсон, *Численное решение задач метода наименьших квадратов*. Наука, М., 1986.

П'ın V. P. Iterative processes in Krylov–Sonneveld subspaces.

The paper presents a generalized block version of the Induced Dimension Reduction (IDR) methods in comparison with the Multi-Preconditioned Semi-Conjugate Direction (MPSCD) algorithms in Krylov subspaces with deflation and low-rank matrix approximation. Common and individual orthogonality and variational properties of these two methodologies are analyzed. It is demonstrated, in particular, that for any sequence of Krylov subspaces with increasing dimensions there exists a sequence of the corresponding shrinking subspaces with decreasing dimensions. The main conclusion is that the IDR procedures, proposed by P. Sonneveld and other authors, are not an alternative to but a further development of the general principles of iterative processes in Krylov subspaces.

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
Новосибирский государственный
университет
Новосибирск, Россия
E-mail: ilin@sscc.ru

Поступило 21 ноября 2016 г.