

В. П. Ильин

О МЕТОДАХ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

§1. ВВЕДЕНИЕ

Мы рассмотрим решение СЛАУ

$$\begin{aligned} Au = \left\{ \sum_{\nu \in \omega_\ell} a_{\ell, \nu} u_\nu \right\} = f, \quad A = \{a_{\ell, \nu}\} \in \mathcal{R}^{N, N}, \\ u = \{u_\ell\}, \quad f = \{f_\ell\} \in \mathcal{R}^N, \end{aligned} \quad (1)$$

с вещественными разреженными матрицами высоких порядков, являющихся в общем случае несимметричными и плохо обусловленными, которые возникают при сеточных аппроксимациях многомерных краевых задач с помощью методов конечных элементов, конечных объемов или других подходов. В уравнении (1) ω_ℓ означает множество индексов ненулевых элементов в ℓ -й строке матрицы A , количество которых N_ℓ предполагается намного меньше N . Рассматриваемые ниже алгоритмы без труда переносятся также на случай комплексных СЛАУ.

Основные современные подходы для быстрого решения рассматриваемых алгебраических систем базируются на предобусловленных итерационных методах в подпространствах Крылова, главные принципы которых изложены, например, в [2]. В частности, высокопроизводительные вычисления с масштабируемым параллелизмом на многопроцессорных вычислительных системах (МВС) с распределенной и иерархической общей памятью обеспечиваются главным образом с помощью эффективных методов декомпозиции областей, см. [3] и цитируемые там работы.

Ключевые слова: итерационные методы, подпространства Крылова, несимметричные матрицы, параллельные алгоритмы, методы наименьших квадратов, численные эксперименты.

Работа поддержана грантами РФФ N 14-11-00485 и РФФИ N 16-29-15122.

В недавно опубликованной статье [1] авторы предложили специальные процедуры ускорения итерационного метода Якоби как “эффективную альтернативу” классическим крыловским методам. Для решения СЛАУ была рассмотрена экстраполяция Андерсона, изначально применявшаяся в работе [4] ее автором для нелинейных систем алгебраических уравнений. Проведенный в [1] сравнительный экспериментальный анализ продемонстрировал значительное превосходство оригинального альтернирующего метода Андерсона–Якоби (ААЯ) над популярным обобщенным методом минимальных невязок GMRES по времени исполнения. Идея алгоритма ААЯ заключается в периодическом использовании, через заданное число стационарных итераций, ускоряющего приема, основанного на решении вспомогательной задачи наименьших квадратов и не использующего ортогонализации направляющих векторов, что является характерным для крыловских методов вариационного типа.

Целью данной работы является обобщение и исследование описанного в [1] экстраполяционного алгоритма Андерсона. Для предлагаемого нами нестационарного итерационного процесса проводится сопоставление с характерным крыловским подходом для решения несимметричных СЛАУ, в качестве которого взят метод полусопряженных невязок [5] с периодическим использованием рестартов, в том числе при их параллельной реализации на многопроцессорных вычислительных системах (МВС).

Настоящая работа построена следующим образом. В §2 мы приводим матричные структуры для некоторых алгоритмов андерсоновского типа, включая обобщенный естественным образом вариант с использованием чебышевского ускорения. §3 посвящен анализу эффективности параллельных версий рассматриваемых итерационных подходов в сравнении с классическим вариационным методом полусопряженных невязок в подпространствах Крылова. В §4 проводится обсуждение результатов численных экспериментов для предлагаемых алгоритмов на серии методических СЛАУ, получаемых из сеточных аппроксимаций двумерных краевых задач для диффузионно-конвективного уравнения.

§2. АЛГОРИТМЫ ЭКСТРАПОЛЯЦИИ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ
КРЫЛОВА

Пусть матрица системы (1) записывается в блочной форме $A = \{A_{k,k'}; k, k' = 1, \dots, P\}$, где $A = D - C$ и $D = \text{block-diag}\{A_{k,k}\}$ есть невырожденная блочно-диагональная матрица, факторизуемая в виде $D = LU$. Тогда исходная СЛАУ с помощью левого и правого преобуславливания приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} L^{-1}(D - C)U^{-1}Uu &= L^{-1}f = \tilde{A}\tilde{u} = (I - T)\tilde{u} = \tilde{f}, \\ \tilde{A} &= L^{-1}AU^{-1} = I - T, \quad \tilde{u} = Uu, \quad \tilde{f} = L^{-1}f, \quad T = L^{-1}CU^{-1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь, если исходная матрица A является симметричной положительно определенной (с.п.о), то \tilde{A} и T также являются с.п.о. матрицами. В этом случае через $0 < \lambda_1 < \lambda_N$ будем обозначать границы спектра преобусловленной матрицы \tilde{A} . Отметим, что в (2) можно рассматривать и одностороннее преобуславливание, полагая, например, $L = D$ или $U = D$.

Для решения СЛАУ (2) можно рассмотреть стационарный метод Рундсона (называемый в [1] взвешенным методом Якоби–WJ):

$$\tilde{u}^{n+1} = \tilde{u}^n + \omega(\tilde{f} - \tilde{A}\tilde{u}^n) = \omega(T\tilde{u}^n + \tilde{f}) + (1 - \omega)\tilde{u}^n = T_\omega\tilde{u}^n + \omega\tilde{f}. \quad (3)$$

Если матрица перехода $T_\omega = \omega T + (1 - \omega)I$ имеет вещественный спектр $\lambda(T_\omega) = 1 - \omega\lambda(\tilde{A})$, то ее спектральный радиус $\rho = \max|\lambda(T_\omega)|$ будет минимальным для значения параметра $\omega = 2/(\lambda_1 + \lambda_N)$. В общем случае сходимость итерационного процесса имеет место при условии $\omega < 2/\|A\|$.

В дальнейшем ради краткости символ “ \sim ” будем опускать. Следуя работе [1], для произвольного начального вектора u^0 рассмотрим следующий итерационный метод Андерсона–Якоби, основанный на добавлении к формулам (3) процедуры коррекции:

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= \check{u}^n + \omega\check{r}^n, \quad \check{r}^n = f - A\check{u}^n, \quad n = 0, 1, \dots, \\ \check{u}^n &= u^n + W_n c^n, \quad \check{u}^0 = u^0. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $c^n = (c_1^n, \dots, c_{m_n}^n) \in \mathcal{R}^{m_n}$ для $m_n \geq 1$ есть некоторый вектор итерационных параметров, а $W_n = (w_1^{(n)}, \dots, w_{m_n}^{(n)}) \in \mathcal{R}^{N, m_n}$ представляет собой прямоугольную матрицу, столбцы $w_s^{(n)}$ которой определяются как

$$w_s^{(n)} = u^{n-s+1} - u^{n-s}, \quad s = 1, \dots, m_n; \quad 1 \leq m_n \ll N. \quad (5)$$

Соответствующая формула для пересчета векторов невязок записывается в виде

$$\check{r}^n = r^n - R_n c^n, \quad R_n = AW_n \in \mathcal{R}^{N, m_n}. \quad (6)$$

Если мы хотим минимизировать норму невязки и определим

$$c^n = \arg \min_{c_k^n} \|\check{r}^n\|^2, \quad \|\check{r}^n\|^2 = (\check{r}^n, \check{r}^n),$$

то из соответствующей задачи наименьших квадратов [6] вектор итерационных параметров определяется как решение СЛАУ

$$(R_n^T R_n) c^n = R_n^T r^n. \quad (7)$$

Если матрица R_n имеет полный ранг, то после подстановки решения $c^n = (R_n^T R_n)^{-1} R_n^T r^n$ в (6) и (4) итерационная формула может быть записана следующим образом:

$$u^{n+1} = u^n + B_n^{-1} r^n, \quad (8)$$

где B_n^{-1} формально представляет собой предобуславливающую матрицу

$$B_n^{-1} = [\omega I + (W_n - \omega R_n)] (R_n^T R_n)^{-1} R_n^T. \quad (9)$$

Вектор \check{u}^n в (4) может быть представлен как

$$\check{u}^n = u^n + c_1^n (u^n - u^{n-1}) + \dots + c_{m_n}^n (u^{n-m_n+1} - u^{n-m_n}),$$

что фактически означает процедуру экстраполяции текущего приближения вектора u^n с использованием m_n предыдущих итераций $u^{n-1}, \dots, u^{n-m_n}$, что и дает название данному методу. Значения $m_n \leq n$ могут меняться от итерации к итерации.

Заметим, что реализация рассмотренного алгоритма требует перемычисления матриц W_n, R_n и B_n на каждой итерации. Кроме того, матрица R_n в (9) может не иметь полный ранг, вообще говоря, и тогда положительно полуопределенная матрица $Q_n = R_n^T R_n \in \mathcal{R}^{m_n, m_n}$ будет плохо обусловленной или вырожденной. В последнем случае должна быть использована обобщенная обратная матрица. В работе [1], в частности, применяется псевдообратная матрица Мура–Пенроуза.

Для упрощения реализации данного алгоритма авторы работы [1] предлагают альтернирующий метод Андерсона–Якоби (ААЯ), который записывается как

$$u^{n+1} = \begin{cases} u^n + \omega r^n, & [a_n]_f \neq 0, \\ u^n + B_n^{-1} r^n, & [a_n]_f = 0, \end{cases} \quad (10)$$

где $[a_n]_f$ означает целую часть величины $a_n = (n+1)/M$, а M есть некоторое целое. Здесь фактически экстраполяционная процедура используется периодически, а на остальных шагах применяется стационарный итерационный процесс. В алгоритме (10) векторы невязок удовлетворяют соотношениям

$$r^{n+1} = \begin{cases} r^n + \omega Ar^n, & [a_n]_f \neq 0, \\ r^n + AB_n^{-1}r^n, & [a_n]_f = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Очевидно, что метод ААЖ представляет собой динамически предобусловленный итерационный процесс в “редуцированных” подпространствах Крылова

$$\mathcal{K}_{M,m}(r^0, A) = \text{span}(A^{M-m}r^0, \dots, A^M r^0), \quad (12)$$

где предполагается $1 \leq m_n = m \leq M$. В случае $M = m = n$ мы имеем обычное “полное” подпространство Крылова

$$\mathcal{K}_n(r^0, A) = \text{span}(r^0, Ar^0, \dots, A^n r^0).$$

Из (11) мы получаем соотношение

$$r^{M+1} = \check{r}^M - A\check{r}^M,$$

где вектор \check{r}^M определяется в (6) при $n = M$. Отсюда следует, что для оптимального вектора коэффициентов $\bar{\alpha}^M$, характеризуемого соотношением (7), имеет место свойство ортогональности

$$W_M^T r^{M+1} = 0. \quad (13)$$

Для рассмотренного подхода можно сделать следующее обобщение. Пусть мы имеем итерационный процесс

$$u^{n+1} = u^n + \omega_n(f - Au^n), \quad (14)$$

где ω_n суть некоторые итерационные параметры, которые могут быть выбраны, например, с помощью корней многочленов Чебышева [7]. Пусть для некоторого $n \geq m > 1$ мы имеем приближенное решение, которое может быть уточнено с помощью линейной комбинации предыдущих итерационных шагов аналогично (4):

$$u = u^n + W_n c^n + \delta_n, \quad c^n \in \mathcal{R}^m, \quad W_n \in \mathcal{R}^{N,m}, \quad (15)$$

где c^n есть неизвестный вектор, прямоугольная матрица W_n определяется в соответствии с (4), (5), а δ_n есть ошибка аппроксимации. После

подстановки (15) в исходную СЛАУ мы имеем

$$A(u^n + W_n c^n + \delta_n) = f.$$

Если в этом соотношении пренебречь величиной ошибки δ_n , то для вектора коэффициентов следует уравнение

$$R_n c^n = r^n, \quad R_n = AW_n \in \mathcal{R}^{N,m}. \quad (16)$$

После вычисления его решения новое итерационное приближение определяется не из (14), а по формуле

$$u^{n+1} = u^n + W_n c^n. \quad (17)$$

Алгебраическая система (16) является переопределенной, и нормальное решение получаемой задачи наименьших квадратов может быть найдено различными способами, см. [6]. Если мы применим к (16) левую трансформацию Гаусса, то есть умножим обе части уравнения на транспонированную матрицу R_n^T , то получим совместную СЛАУ вида (7) с симметричной положительно полуопределенной или плохо обусловленной с.п.о. матрицей $Q_n = R_n^T R_n$. В этом случае для откорректированного, или экстраполированного, итерационного приближения вместо (17) мы имеем формулу

$$u^{n+1} = u^n + \bar{Q}_n A^T r^n, \quad \bar{Q}_n = W_n (W_n^T A^T A W_n)^{-1} W_n^T \in \mathcal{R}^{N,N}. \quad (18)$$

Отметим, что в современной терминологии матрица \bar{Q}_n является малоранговой аппроксимацией (см. [3] и цитируемые там работы) матрицы $(A^T A)^{-1}$ (или обобщенной обратной, если $A^T A$ вырождена).

Более устойчивые процедуры решения (17) базируются на применении методов сингулярного разложения или QR-факторизации непосредственно к СЛАУ (16), поскольку, очевидно, матрица Q_n имеет гораздо большее число обусловленности, чем R_n .

Заметим, что вместо использования формулы (14) мы можем применить трехчленный алгоритм чебышевского ускорения

$$\begin{aligned} u^1 &= u^0 + \tau r^n, \quad \tau = 2/(\lambda_1 + \lambda_N), \\ u^{n+1} &= u^n + \tau_n \tau r^n + (\tau_n - 1)(u^n - u^{n-1}), \quad \tau_0 = 2, \\ \tau_n &= 4(4 - \tau_{n-1} \gamma)^{-1}, \quad \gamma = (1 - c)/(1 + c), \quad c = \lambda_1/\lambda_N, \end{aligned} \quad (19)$$

где λ_1 и λ_N суть минимальное и максимальное собственные числа симметричной матрицы A .

Отметим, что формулы (19) обеспечивают оптимальность текущего итерационного приближения, в спектральном смысле, для каждого

значения n . Когда A является несимметричной матрицей, то вместо формул (19) могут применяться их обобщения, если ее комплексный спектр лежит в эллипсе с известными геометрическими параметрами, см. [2, 7].

На основе метода чебышевского ускорения мы рассмотрим два итерационных процесса, основанных на периодической реализации из M шагов по формулам (19) и последующей коррекции итерационного приближения с помощью одного из алгоритмов решения задачи наименьших квадратов:

- первый вариант метода наименьших квадратов МНК-1 основан на решении вспомогательной СЛАУ (7), полученной с помощью предварительной трансформации Гаусса;
- вариант МНК-2 отличается тем, что для нахождения вектора коэффициентов коррекции c^n используется непосредственное решение переопределенной системы (16) с использованием алгоритма сингулярного разложения SVD (эта же процедура используется для вычисления вектора c^n в МНК-1).

После проведения коррекции, или экстраполяции, по формулам типа (17) следующий вектор невязки определяется из исходного уравнения, и таким образом циклы “чебышевское ускорение + коррекция” повторяются до сходимости итераций с заданной точностью. Отметим, что во всех рассмотренных методах векторы невязок лежат в крыловских подпространствах вида (12).

Отметим, что в теоретическом плане МНК-1 и МНК-2 совпадают, так как в точной арифметике решения систем уравнений (7) и (16) дают один и тот же вектор

$$c^n = (P_n^{(m)})^T S_n^{-1} (P_n^{(N)})^T r^n, \quad (20)$$

где $P_n^{(m)} \in \mathcal{R}^{m,m}$ и $P_n^{(N)} \in \mathcal{R}^{N,N}$ суть ортогональные матрицы, а $S_n^{-1} = \text{diag} \{s_k^{-1}; k = 1, \dots, m < N\} \in \mathcal{R}^{N,m}$ – диагональная матрица, ненулевые элементы которой $s_{i,j}^{-1} = s_i^{-1} \delta_{i,j}$ являются обратными значениями к сингулярным числам s_i матрицы R_n , что следует из сингулярных разложений матриц

$$R_n = P_n^{(N)} S_n P_n^{(m)}, \quad Q_n = (P_n^{(m)})^T S_n^T S_n P_n^{(m)}.$$

В заключение данного параграфа сделаем два замечания. Первое касается того, что построение экстраполяционных процессов вида

(8), (10) с матрицами B_n фактически означает применение полиномиального предобуславливания, см., например, [8]. Второе замечание является также справочным: аналогичный рассмотренному нами подход применялся П. Монтгомери в работе [9] для решения специальных СЛАУ над конечным полем и назывался блочным методом Ланцоша.

§3. ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ РЕАЛИЗАЦИИ МНК И МЕТОДОВ ПОЛУСОПРЯЖЕННЫХ НЕВЯЗОК В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

Мы рассмотрим допустимые ускорения вычислений в параллельных версиях методов наименьших квадратов и алгоритма полусопряженных невязок (SCR, [5]), без предобуславливания, который по скорости сходимости эквивалентен популярному алгоритму обобщенных минимальных невязок (GMRES, [2]), но описывается более простыми формулами:

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, & \alpha_n &= \sigma_n / \rho_n, & p^0 &= r^0 = f - Au^0, \\ r^{n+1} &= r^n - \alpha_n Ap^n, & \rho_n &= (Ap^n, Ap^n), & \sigma_n &= (Ar^n, r^n). \end{aligned} \quad (21)$$

Данный итерационный процесс обеспечивает минимум нормы $\|r^{n+1}\|$ в подпространстве Крылова $\mathcal{K}_n(r_0, A)$ и полусопряженность векторов невязок

$$(Ar^n, r^k) = \begin{cases} 0, & k < n, \\ \sigma^n, & k = n, \end{cases}$$

если направляющие векторы p^n ортогональны в смысле

$$(Ap^n, Ap^k) = \rho_n \delta_{n,k}, \quad (22)$$

где $\delta_{n,k}$ есть символ Кронекера. Свойства (22) выполняются, если векторы p^n вычисляются из рекуррентных соотношений

$$p^{n+1} = r^{n+1} - \sum_{k=0}^n \beta_{n,k} p^k, \quad \beta_{n,k} = (Ap^k, Ar^{n+1}) / \rho_n. \quad (23)$$

Отметим, что на каждой итерации метод SCR требует только одного умножения матрицы на вектор, поскольку из (23) следует аналогичное рекурсивное соотношение

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

Если матрица A симметрична, то векторы невязок становятся A -ортогональными, а рекурсии (23) делаются короткими, поскольку

$$(Ar^n, r^k) = \sigma_n \delta_{n,k}, \quad \beta_{n,k} = \beta_{n,n} \delta_{n,k}, \quad (24)$$

и мы приходим к алгоритму сопряженных невязок (CR, см. [2]).

В общем случае для вычисления векторов u^n и r^n с помощью формул (20)–(23) необходимо хранить все векторы $p^n, p^{n-1}, \dots, p^{n-M}$. На практике методы SCR реализуются с периодическими рестартами после каждых M итераций. Это означает, что вектор невязки вычисляется не с помощью рекурсии из (21), а из исходного уравнения:

$$r^{Ml} = f - Au^{Ml}, \quad l = 0, 1, \dots, \quad (25)$$

а следующие приближения начинают считаться “с начала”, т.е. для $n > M$ в формулах надо заметить n на $n - Ml$. При этом необходимо хранить только $M + 1$ последних векторов $p^n, p^{n-1}, \dots, p^{n-M}$.

Сравним теперь особенности параллельных реализаций цикла из M итераций в методах МНК и SCR. Отметим, что этого будет достаточно для качественного сравнения производительности данных алгоритмов, поскольку они теоретически эквивалентны по скорости сходимости, так как минимизируют одинаковый функционал в одном и том же подпространстве Крылова.

Относительно рассматриваемых методов предполагаем, что они применяются к блочной структуре СЛАУ вида (2), блочные строки которой $A_k = \{A_{k,l}, l = 1, \dots, P\} \in \mathcal{R}^{N_k \times N}$, $N_k \cong N/P$, $N_1 + \dots + N_p = N$, распределены в памяти соответствующих MPI-процессов, используемых для первого уровня распараллеливания алгоритмов, как это делается в методах декомпозиции областей (при этом одной подобласти соответствует одна блочная строка, см. [10]). Отметим, что фактически разным MPI-процессам соответствуют разные компьютерные процессоры (хотя формально это не обязательно), и мы иногда эти категории будем рассматривать как эквивалентные.

В методе SCR направляющие векторы $p^n, p^{n-1}, \dots, p^{n-M}$, а также текущие итерационные приближения u^n, r^n разбиваются на подвекторы с длинами N_k , каждый из которых хранится в соответствующем k -м MPI-процессе. По мере выполнения итераций между процессами происходят необходимые обмены данными, объемы которых желательно минимизировать. При исполнении арифметических операций в k -м MPI-процессе с применением многоядерного процессора может осуществляться “внутреннее” распараллеливание (второго

уровня) на основе многопоточковых вычислений, детали которых мы опускаем. Аналогичная распределенная структура данных формируется и в методах наименьших квадратов, и в данном случае блочное разбиение организуется для векторов $w_s^{(M)}$, $s = 1, \dots, M$. При этом для всех алгоритмов предполагается использование стандартной машинной арифметики с двойной точностью.

Для сравнительного анализа производительности рассматриваемых методов мы оцениваем время T_P исполнения на P МРІ-процессах одинакового цикла из M итераций на основе простейшей модели вычислительного процесса:

$$T_P = T_P^a + T_P^c \approx \tau_a V_a + (\tau_0 + \tau_c V_c) N_c. \quad (26)$$

Здесь T_P^a и T_P^c означают времена исполнения арифметических действий и коммуникаций соответственно, τ_a и N_a суть среднее время одной арифметической операции и их общее количество (для одного процессора), N_c – общее количество передач данных, τ_0 – время задержки (настройки) одной транзакции, τ_c – среднее время передачи одного вещественного числа, а V_c есть средний объем одного пакета передаваемой информации. Отметим, что в силу выполняемых соотношений $\tau_0 \gg \tau_c \gg \tau_a$ естественно стараться минимизировать не только общий объем передаваемой информации, но и само количество обменов. Последнее важно не только с точки зрения времени передачи данных, но и в силу высокой энергозатратности коммуникационных операций.

Сопоставление формул (19) для чебышевского ускорения (мы рассмотрим их применение только в составе МНК-1) и соотношений (21), (23) для метода полусопряженных невязок позволяет сделать следующие выводы. Метод SCR на каждой из итераций требует выполнения одного матрично-векторного умножения и $2(M+1)$ векторных операций, а также вычисления $M+2$ скалярных произведений векторов. В случае симметричной матрицы A , когда мы приходим к методу CR, количество указанных векторных операций сокращается до 4 и до 2 соответственно. Принципиальным моментом является то, что этот пакет действий на каждой из M итераций может выполняться только последовательно.

С другой стороны, реализация каждого шага чебышевского ускорения (19) требует выполнения одного матрично-векторного умножения

и 5 векторных операций, но при этом отсутствуют векторные скалярные произведения. Для реализации МНК-1 необходимо, однако, определение M^2 элементов матрицы $Q_n = \{q_{k,\ell} = (Aw_k, Aw_\ell)\}$, но все они могут вычисляться после завершения M итераций одновременно! Помимо ускорения вычислений в M раз это одновременно дает пропорциональное сокращение количества обменов, неизбежных при вычислении скалярных произведений векторов, распределенных по разным процессорам, поскольку необходимые для передачи частичные суммы в каждом CPU можно собрать в один информационный буфер.

Таким образом, не вдаваясь в технические детали, мы можем констатировать, что применение чебышевского ускорения с коррекцией приближений по методам наименьших квадратов дает значительное преимущество над классическими крыловскими методами при их параллельной реализации на МВС. Отметим, что формулы чебышевского ускорения (1) не дают оптимального ускорения в случае комплексного спектра матрицы A , но это не суть важно, поскольку они используются фактически только для экономичного построения базиса в подпространстве Крылова.

§4. ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим задачу Дирихле для диффузионно-конвективного уравнения

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + p \frac{\partial u}{\partial x} + q \frac{\partial u}{\partial y} = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad (27)$$

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

в квадратной расчетной области $\Omega = (0, 1)^2$ с границей Γ и конвективными коэффициентами p, q , которые для простоты считаем постоянными.

Данная краевая задача аппроксимируется на квадратной сетке с шагом $h = 1/(L + 1)$ и общим числом внутренних узлов $N = L^2$:

$$x_i = ih, \quad y_j = jh, \quad i, j = 0, 1, \dots, L + 1,$$

с помощью пятиточечных конечно-объемных монотонных аппроксимаций экспоненциального типа [11], имеющих второй порядок точности:

$$(Au)_l = a_{l,l}u_l + a_{l,l-1}u_{l-1} + a_{l,l+1}u_{l+1} + a_{l,l-L}u_{l-L} + a_{l,l+L}u_{l+L} = f_l, \quad (28)$$

где ℓ есть “глобальный” номер узла сетки, при использовании естественной нумерации $\ell = i + (j - 1)L$.

Вообще говоря, формулы для коэффициентов в уравнениях (28) могут иметь различный вид, и мы используем следующее их представление:

$$\begin{aligned} a_{i,l\pm 1} &= e^{\pm ph/2}/h, & a_{i,l\pm L} &= e^{\pm qh/2}/h, \\ a_{i,l} &= a_{i,l-1} + a_{i,l-L} + a_{i,l+1} + a_{i,l+L}. \end{aligned} \quad (29)$$

Уравнения (28) написаны для внутренних узлов сетки, но для околограничных узлов, имеющих индексы $i = 1, L$ или $j = 1, L$, значения решения на границе должны быть подставлены в систему и перенесены в ее правую часть, при этом соответствующие коэффициенты левой части формально можно считать нулевыми. В проводимых нами экспериментах фактически решались нормализованные уравнения, получаемые из следующих преобразований с диагональной матрицей $D = \text{diag} \{a_{\ell,\ell}\}$:

$$\begin{aligned} D^{-1/2}AD^{-1/2}D^{1/2}u &= D^{-1/2}f, \\ \bar{A}\bar{u} &= \bar{f}, \quad \bar{A} = D^{-1/2}AD^{-1/2}, \quad \bar{u} = D^{1/2}u, \quad \bar{f} = D^{-1/2}f. \end{aligned} \quad (30)$$

Численные эксперименты проводились со стандартной двойной точностью для значений функций $f(x, y) = 0$ и $g(x, y) = 1$, соответствующих точному решению задачи (27) $u(x, y) = 1$. Поскольку скорость сходимости итераций зависит от начальной ошибки $u - u^0$, ее влияние анализировалось путем сравнения результатов для начальных приближений $u^0 = 0$ и $u^0 = P_2(x, y) = x^2 + y^2$. Критерием окончания итераций служило условие $(r^n, r^n) \leq \varepsilon^2(f, f)$ при $\varepsilon = 10^{-7}$. Расчеты проводились на сетках с числом узлов $N = 7^2, 15^2, 31^2, 63^2$ и 127^2 со значениями $m = 8, 16, 32, 64$ и 128 .

В приведенных ниже таблицах даны результаты численных экспериментов по решению задачи (27) со значениями конвективных коэффициентов $p = q = 0$ и $p = q = 4$ на сетках с числом узлов $N = 7^2, 15^2, 31^2, 63^2, 127^2$ и различными начальными приближениями. Применяемые алгоритмы отличаются способом формирования вспомогательной СЛАУ для вектора коэффициентов коррекции c^n (конкретно получаемые системы в МНК-1 и МНК-2 решались с помощью метода SVD из комплекса программ LAPACK, включенного в библиотеку MKL Intel [12]).

В таблицах 1, 2 мы приводим результаты численных экспериментов для МНК-1 и МНК-2 при нулевых конвективных коэффициентах и двух разных начальных приближениях u^0 . В каждой клетке таблиц верхнее число – это общее количество итераций, а нижнее – максимальная ошибка полученного решения. Столбцы со значением $m = \infty$ соответствуют тому, что итерации проводились до выполнения критерия останова только методом чебышевского ускорения без использования коррекции приближения u^n с помощью МНК.

Таблица 1. Численные результаты для МНК-1,
 $p = q = 0$, $u^0 = P_2(x, y)$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128	∞
7^2	37 $1.8 \cdot 10^{-7}$	27 $4.2 \cdot 10^{-8}$	32 $1.1 \cdot 10^{-15}$	41 $1.2 \cdot 10^{-7}$	41 $1.2 \cdot 10^{-7}$	41 $1.2 \cdot 10^{-7}$
15^2	98 $9.8 \cdot 10^{-7}$	75 $6.8 \cdot 10^{-7}$	56 $1.3 \cdot 10^{-7}$	64 $4.7 \cdot 10^{-10}$	82 $2.0 \cdot 10^{-7}$	82 $2.0 \cdot 10^{-7}$
31^2	313 $3.5 \cdot 10^{-6}$	198 $2.9 \cdot 10^{-6}$	147 $1.7 \cdot 10^{-6}$	112 $3.4 \cdot 10^{-7}$	128 $1.8 \cdot 10^{-8}$	163 $3.0 \cdot 10^{-7}$
63^2	1083 $1.0 \cdot 10^{-5}$	625 $1.0 \cdot 10^{-5}$	389 $8.9 \cdot 10^{-6}$	291 $4.6 \cdot 10^{-6}$	206 $9.6 \cdot 10^{-7}$	327 $3.1 \cdot 10^{-7}$
127^2	3859 $2.9 \cdot 10^{-5}$	2118 $2.8 \cdot 10^{-5}$	1184 $2.8 \cdot 10^{-5}$	746 $2.8 \cdot 10^{-5}$	537 $2.0 \cdot 10^{-5}$	653 $3.5 \cdot 10^{-7}$

Таблица 2. Численные результаты для МНК-2,
 $p = q = 0$, $u^0 = P_2(x, y)$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128	∞
7^2	37 $1.8 \cdot 10^{-7}$	32 $1.3 \cdot 10^{-7}$	39 $3.3 \cdot 10^{-8}$	41 $1.2 \cdot 10^{-7}$	41 $1.2 \cdot 10^{-7}$	41 $1.3 \cdot 10^{-7}$
15^2	98 $9.8 \cdot 10^{-7}$	75 $6.8 \cdot 10^{-7}$	68 $4.9 \cdot 10^{-7}$	82 $2.0 \cdot 10^{-7}$	82 $2.0 \cdot 10^{-7}$	82 $2.0 \cdot 10^{-7}$
31^2	313 $3.5 \cdot 10^{-6}$	198 $2.9 \cdot 10^{-6}$	146 $1.7 \cdot 10^{-6}$	160 $8.0 \cdot 10^{-8}$	162 $1.3 \cdot 10^{-7}$	163 $3.0 \cdot 10^{-7}$
63^2	1083 $1.0 \cdot 10^{-5}$	624 $1.0 \cdot 10^{-5}$	389 $8.9 \cdot 10^{-6}$	262 $3.0 \cdot 10^{-6}$	298 $7.4 \cdot 10^{-7}$	327 $3.1 \cdot 10^{-7}$
127^2	3859 $2.9 \cdot 10^{-5}$	2117 $2.8 \cdot 10^{-5}$	1183 $2.8 \cdot 10^{-5}$	556 $2.0 \cdot 10^{-5}$	537 $2.0 \cdot 10^{-5}$	653 $3.5 \cdot 10^{-7}$

В таблицах 3, 4 аналогичные результаты представлены для коэффициентов $p = q = 4$.

Таблица 3. Численные результаты для МНК-1,
 $p = q = 4, u^0 = P_2(x, y)$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128	∞
7	30 $1.3 \cdot 10^{-7}$	36 $1.8 \cdot 10^{-9}$	31 $2.5 \cdot 10^{-13}$	32 $8.2 \cdot 10^{-8}$	45 $8.2 \cdot 10^{-8}$	45 $8.2 \cdot 10^{-8}$
15	73 $9.3 \cdot 10^{-7}$	68 $6.1 \cdot 10^{-7}$	63 $1.1 \cdot 10^{-8}$	64 $1.0 \cdot 10^{-8}$	91 $1.6 \cdot 10^{-7}$	91 $1.6 \cdot 10^{-7}$
31	236 $2.7 \cdot 10^{-6}$	151 $1.5 \cdot 10^{-6}$	125 $1.1 \cdot 10^{-6}$	127 $7.8 \cdot 10^{-9}$	128 $1.4 \cdot 10^{-7}$	184 $2.1 \cdot 10^{-7}$
63	592 $7.9 \cdot 10^{-6}$	472 $8.0 \cdot 10^{-6}$	302 $5.4 \cdot 10^{-6}$	253 $6.7 \cdot 10^{-6}$	247 $2.8 \cdot 10^{-6}$	363 $1.7 \cdot 10^{-7}$
127	2612 $2.3 \cdot 10^{-5}$	1348 $2.3 \cdot 10^{-5}$	900 $1.9 \cdot 10^{-5}$	569 $1.8 \cdot 10^{-5}$	509 $3.7 \cdot 10^{-6}$	719 $1.6 \cdot 10^{-7}$

Таблица 4. Численные результаты для МНК-2,
 $p = q = 4, u^0 = P_2(x, y)$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128	∞
7	36 $1.3 \cdot 10^{-7}$	31 $1.4 \cdot 10^{-7}$	46 $7.5 \cdot 10^{-8}$	45 $8.2 \cdot 10^{-8}$	45 $8.2 \cdot 10^{-8}$	45 $8.2 \cdot 10^{-8}$
15	73 $9.3 \cdot 10^{-7}$	68 $6.1 \cdot 10^{-7}$	63 $2.3 \cdot 10^{-7}$	94 $1.0 \cdot 10^{-7}$	91 $1.6 \cdot 10^{-7}$	91 $1.6 \cdot 10^{-7}$
31	236 $2.7 \cdot 10^{-6}$	151 $1.5 \cdot 10^{-6}$	125 $9.7 \cdot 10^{-7}$	163 $7.8 \cdot 10^{-7}$	128 $1.2 \cdot 10^{-13}$	184 $2.1 \cdot 10^{-7}$
63	592 $7.9 \cdot 10^{-6}$	472 $8.0 \cdot 10^{-6}$	302 $5.3 \cdot 10^{-6}$	253 $6.7 \cdot 10^{-6}$	247 $2.8 \cdot 10^{-6}$	363 $1.7 \cdot 10^{-7}$
127	2612 $2.3 \cdot 10^{-5}$	1349 $2.3 \cdot 10^{-5}$	900 $1.9 \cdot 10^{-5}$	569 $1.8 \cdot 10^{-5}$	509 $3.7 \cdot 10^{-6}$	730 $3.0 \cdot 10^{-7}$

Таблицы 5, 6 содержат численные результаты для начального приближения $u^0 = 0$.

На основе полученных расчетных данных можно сделать следующие выводы.

- Применение периодической коррекции чебышевского ускорения по методам наименьших квадратов существенно ускоряет

Таблица 5. Численные результаты для МНК-1,
 $p = q = 0, u^0 = 0$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128	∞
7^2	22 $2.3 \cdot 10^{-8}$	16 $3.3 \cdot 10^{-16}$	32 $6.6 \cdot 10^{-16}$	41 $1.7 \cdot 10^{-7}$	41 $1.7 \cdot 10^{-7}$	41 $1.7 \cdot 10^{-7}$
15^2	65 $1.2 \cdot 10^{-6}$	59 $3.6 \cdot 10^{-7}$	32 $2.0 \cdot 10^{-9}$	64 $1.3 \cdot 10^{-15}$	83 $2.2 \cdot 10^{-7}$	83 $2.2 \cdot 10^{-7}$
31^2	318 $3.5 \cdot 10^{-6}$	174 $3.4 \cdot 10^{-6}$	109 $1.3 \cdot 10^{-6}$	64 $5.7 \cdot 10^{-10}$	128 $1.3 \cdot 10^{-9}$	167 $3.3 \cdot 10^{-7}$
63^2	1116 $1.0 \cdot 10^{-5}$	635 $1.0 \cdot 10^{-5}$	384 $9.1 \cdot 10^{-6}$	215 $3.0 \cdot 10^{-6}$	128 $1.5 \cdot 10^{-7}$	335 $3.9 \cdot 10^{-7}$
127^2	3987 $2.9 \cdot 10^{-5}$	2190 $2.8 \cdot 10^{-5}$	1217 $2.7 \cdot 10^{-5}$	764 $2.7 \cdot 10^{-5}$	382 $9.9 \cdot 10^{-6}$	670 $3.9 \cdot 10^{-7}$

Таблица 6. Численные результаты для МНК-2,
 $p = q = 4, u^0 = 0$.

$N \setminus m$	8	16	32	64	128	∞
7^2	37 $5.6 \cdot 10^{-8}$	32 $5.3 \cdot 10^{-8}$	46 $6.4 \cdot 10^{-8}$	45 $7.0 \cdot 10^{-8}$	45 $7.0 \cdot 10^{-8}$	45 $7.1 \cdot 10^{-8}$
15^2	77 $2.5 \cdot 10^{-7}$	76 $2.1 \cdot 10^{-7}$	83 $2.6 \cdot 10^{-7}$	93 $1.6 \cdot 10^{-7}$	91 $1.4 \cdot 10^{-7}$	91 $1.4 \cdot 10^{-7}$
31^2	216 $2.5 \cdot 10^{-6}$	151 $1.6 \cdot 10^{-6}$	153 $1.7 \cdot 10^{-6}$	162 $8.4 \cdot 10^{-7}$	187 $3.0 \cdot 10^{-7}$	184 $2.0 \cdot 10^{-7}$
63^2	507 $7.4 \cdot 10^{-6}$	468 $7.9 \cdot 10^{-6}$	304 $5.2 \cdot 10^{-6}$	253 $2.2 \cdot 10^{-6}$	341 $1.8 \cdot 10^{-6}$	363 $1.6 \cdot 10^{-7}$
127^2	2416 $2.3 \cdot 10^{-5}$	1071 $2.3 \cdot 10^{-5}$	914 $2.3 \cdot 10^{-5}$	569 $1.1 \cdot 10^{-5}$	509 $4.2 \cdot 10^{-6}$	721 $1.7 \cdot 10^{-7}$

итерационный процесс, причем для каждой сетки, или размерности СЛАУ, существует свое оптимальное значение параметра рестарта m .

- Рассмотренные варианты МНК-1 и МНК-2 обнаруживают приемлемую устойчивость для различных шагов сетки и разных начальных приближениях. На некоторых итерационных циклах матрицы R_n имеют неполный ранг, но это практически не влияет на число итераций.

- Итерационные процессы с МНК-1 и МНК-2 дают примерно одинаковую скорость сходимости для рассмотренных симметричных и несимметричных СЛАУ с разными значениями конвективных коэффициентов p, q .
- Проведенные дополнительные эксперименты, результаты которых мы ради краткости опускаем, обнаруживают достаточную устойчивость к “возмущению” чебышевского ускорения. Например, если в формулах (19) величину λ_1 увеличить в несколько раз или даже положить $\tau_n = 1$, т.е. использовать стационарный алгоритм Ричардсона, то число итераций несколько увеличивается, но ненамного.

В заключение сделаем следующее замечание: рассмотрение в работе [1] применения МНК следует классифицировать не как “эффективную альтернативу” крыловским итерационным методам, а как существенное обогащение данного класса алгоритмов, особенно перспективное при распараллеливании на МВС. Вопросы же исследования производительности и эффективности этих методов, в том числе с применением декомпозиции областей и разных типов предобуславливателей, требуют дополнительных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. P. Pratara, P. Suryanarayana, J. E. Pask, *Anderson acceleration of the Jacobi iterative method. An efficient alternative to Krylov methods for large, sparse linear systems.* — J. Comput. Phys. **306** (2016), 43–54.
2. Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWS Publ, New York, 2002.
3. В. П. Ильин, *О проблемах параллельного решения больших СЛАУ.* — Зап. научн. семин. ПОМИ **439** (2015), 112–127.
4. D. G. Anderson, *Iterative procedures for nonlinear integral equations.* — J. Assoc. Comput. Mach. **12** (1965), 547–560.
5. V. P. Il'in, *Methods of semiconjugate directions.* — Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. **23**, No. 4 (2008), 369–387.
6. Ч. Лоусон, Р. Хенсон, *Численное решение задач методом наименьших квадратов*, Наука, М., 1986.
7. А. А. Самарский, Е. С. Николаев. *Методы решения сеточных уравнений*, Наука, М., 1978.
8. D. P. O'Leary, *Yet another polynomial preconditioner for the conjugate gradient algorithm.* — Linear Algebra Appl. **154** (1991), 377–388.
9. P. L. Montgomery, *A block Lanczos algorithm for finding dependences over GF(2).* — Proc. EUROCRYPT 95 Conf., LNCS, **921**, (1995), 106–120.
10. Я. Л. Гурьева, В. П. Ильин, *О некоторых параллельных методах и технологиях декомпозиции областей.* — Зап. научн. семин. ПОМИ **428** (2014), 89–106.

11. V. P. Il'in, *On exponential finite volume approximations*. — Rus. J. Num. Anal. Math. Model. **18**, No. 6 (2003), 479–506.
12. Intel Mathematical Kernel Library from Intel//<http://software.intel.com/en-us/intel-mkl>.

Il'in V. P. Least squares methods in Krylov subspaces.

The paper considers iterative algorithms for solving large systems of linear algebraic equations with sparse nonsymmetric matrices based on solution of least squares problems in Krylov subspaces and generalizing the alternating Anderson–Jacobi method. The approaches suggested are compared with the classical Krylov methods, represented by the method of semi-conjugate residuals. The efficiency of parallel implementation and speedup are estimated and illustrated with numerical results obtained for a series of linear systems resulting from discretization of convection-diffusion boundary-value problems.

Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН
Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия
E-mail: ilin@sscc.ru

Поступило 11 ноября 2016 г.