

Я. Л. Гурьева, В. П. Ильин

О МЕТОДАХ СОПРЯЖЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ ДЛЯ МНОГОКРАТНОГО РЕШЕНИЯ СЛАУ

§1. ВВЕДЕНИЕ

Многократное решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) высоких порядков с одной и той же матрицей, но с разными правыми частями

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

когда векторы $f^{(l)}$ не известны одновременно, а определяются последовательно, возникает во многих актуальных приложениях. Например, такие ситуации имеют место при решении нестационарных и/или нелинейных начально-краевых многомерных задач со сложной геометрией расчётных областей, аппроксимируемых неявными методами конечных разностей, конечных элементов, конечных объёмов или разрывными алгоритмами Галеркина различных порядков точности [1], когда СЛАУ требуется решать на каждом временном шаге или на разных нелинейных итерациях. Другие случаи возникают при решении ресурсоёмких крупноблочных алгебраических систем, использующих двухуровневые итерационные процессы, в которых на каждой внешней итерации требуется найти приближённое решение вспомогательной СЛАУ.

В таких задачах естественно ожидать, что при итерационном решении первой СЛАУ можно сформировать некоторую полезную информацию о свойствах матрицы A , а затем использовать ее для ускорения алгоритмов в последующих системах. Подобный подход, названный дефляцией, был предложен для метода сопряжённых градиентов в работах Р. Николайдеса [2] и З. Досталь [3], а затем исследовался многими авторами, см. [4–18] и цитируемые там работы.

Ключевые слова: симметричные системы линейных алгебраических уравнений, многократные решения, методы сопряжённых направлений, алгоритмы дефляции, параллельные вычисления.

Работа поддержана грантом РФФИ No. 18-01-00295.

Естественно, что при этом используются итерационные процессы в подпространствах Крылова, которые после решения первой СЛАУ позволяют запомнить или направляющие векторы, или приближенное решение спектральной проблемы для исходной матрицы, после чего для последующих систем специальным образом вычисляются начальные приближения и/или строится какой-нибудь предобуславливатель, или применяются проекционные и другие подходы.

В рассматриваемых подходах с практической точки зрения имеет значение не столько повышение скорости сходимости получаемых итерационных процедур, сколько итоговая производительность алгоритмов при их реализации на современных многопроцессорных вычислительных системах (МВС) с распределённой и иерархической общей памятью. Здесь основную роль играют два момента: масштабируемость распараллеливания на супер ЭВМ гетерогенной архитектуры и эффективность работы с большими данными при использовании сжатых разреженных матричных форматов, см. [19] и приведённую там литературу.

Настоящая работа построена следующим образом. В §2 мы рассматриваем особенности предобусловленных итерационных методов сопряжённых направлений в подпространствах Крылова, в том числе, с приближённым итерационным обращением предобуславливающей матрицы, причём для простоты рассматриваются симметричные положительно определённые (с.п.о.) алгебраические системы. §3 посвящён обсуждению различных алгоритмов дефляционного и проекционного типов, а также их применению к многократному решению СЛАУ с одинаковыми матрицами. В заключительном параграфе приводятся результаты численных экспериментов для характерных методических задач, демонстрирующих качества исследуемых алгоритмов, а также обсуждаются вопросы дальнейших исследований рассматриваемой проблемы.

§2. ПРЕДОБУСЛАВЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

Рассмотрение итерационных алгоритмов мы будем сначала проводить в применении к СЛАУ, полученной из исходной системы вида (1) путем двустороннего предобуславливания:

$$\bar{A}\bar{u} = \bar{f}, \quad \bar{A} = L_B^{-1}AU_B^{-1}, \quad \bar{u} = U_B u, \quad \bar{f} = L_B^{-1}f. \quad (2)$$

Здесь L_B и U_B – сомножители из разложения невырожденной предобуславливающей матрицы

$$B = L_B U_B, \quad B^{-1} = U_B^{-1} L_B^{-1}. \quad (3)$$

Для решения предобусловленной СЛАУ $\bar{A}\bar{u} = \bar{f}$ с симметричной положительно определенной матрицей $\bar{A} = \bar{A}^\top$ рассмотрим итерационные процессы следующего вида:

$$\begin{aligned} \bar{r}^0 &= \bar{f} - \bar{A}\bar{u}^0, \quad \bar{p}^0 = \bar{r}^0, \quad n = 0, 1, \dots : \\ \bar{u}^{n+1} &= \bar{u}^n + \alpha_n \bar{p}^n = \bar{u}^0 + \alpha_0 \bar{p}^0 + \dots + \alpha_n \bar{p}^n, \\ \bar{r}^{n+1} &= \bar{f} - \bar{A}\bar{u}^{n+1} = \bar{r}^n - \alpha_n \bar{A}\bar{p}^n = \bar{r}^0 - \alpha_0 \bar{A}\bar{p}^0 - \dots - \alpha_n \bar{A}\bar{p}^n, \end{aligned} \quad (4)$$

где \bar{p}^n – некоторые направляющие векторы, α_n – итерационные параметры, $\bar{u}^0 = U_B u^0$ и \bar{r}^0 – предобусловленные векторы начального приближения и невязки, а u^0 – произвольный вектор.

В формулах (4) предполагается, что векторы p^n обладают следующими свойствами ортогональности:

$$(\bar{A}^\gamma p^n, p^k) = (p^n, p^k)_\gamma = \rho_n^{(\gamma)} \delta_{k,n}, \quad \rho_n^{(\gamma)} = (p^n, p^n)_\gamma, \quad (5)$$

где $\gamma = 1, 2$, а $\delta_{k,n}$ – символ Кронекера. При этих условиях для невязки имеем соотношения

$$(\bar{r}^{n+1}, \bar{r}^{n+1})_{\gamma-2} = (\bar{r}^0, \bar{r}^0)_{\gamma-2} - \sum_{k=0}^n \left[2\alpha_k (\bar{r}^0, p^k)_{\gamma-1} - \alpha_k^2 (p^k, p^k)_\gamma \right].$$

Отсюда получаем, что если коэффициенты α_n равны

$$\alpha_n = \sigma_n / \rho_n, \quad \sigma_k = (\bar{r}^0, p^k)_{\gamma-1}, \quad (6)$$

то справедливы следующие равенства для функционала невязки:

$$\Phi_\gamma(\bar{r}^{n+1}) = \Phi_\gamma(\bar{r}^0) - \sum_{k=0}^n \sigma_k^2 / \rho_k, \quad (7)$$

где знак “ γ ” у α_k, σ_k и ρ_k для краткости опущен. При этом функционалы достигают минимума в подпространствах Крылова

$$\mathcal{K}_{n+1}(\bar{r}^0, \bar{A}) = \text{Span} \{ \bar{r}^0, \bar{A}\bar{r}^0, \dots, \bar{A}^n \bar{r}^0 \}. \quad (8)$$

Для обеспечения условий ортогональности (5) направляющие векторы могут определяться из рекурсий

$$p^0 = \bar{r}^0, \quad p^{n+1} = \bar{r}^{n+1} + \beta_n p_n, \quad \beta_n = -(\bar{r}^{n+1}, p^n)_\gamma / \rho_n, \quad (9)$$

где правило нахождения начального вектора p^0 является общепринятым, но не обязательным (строго говоря, он может быть произвольным). При этом выполняются дополнительные свойства ортогональности векторов:

$$(r^k, r^n)_{\gamma-1} = \|r^n\|_{\gamma-1} \delta_{k,n}, \quad (r^n, p^k)_{\gamma-1} = 0 \quad \text{при } k < n, \quad (10)$$

а также равенства $(\bar{r}^0, \rho^n)_{\gamma-1} = (\bar{r}^n, \bar{r}^n)_{\gamma-1}$, из которых следуют новые формулы для коэффициентов σ_n, β_n :

$$\sigma_n = (\bar{r}^n, \bar{r}^n)_{\gamma-1}, \quad \beta_n = \sigma_{n+1}/\sigma_n. \quad (11)$$

Описанные алгоритмы сопряженных направлений (CD – от Conjugate Directions) для решения СЛАУ (2) при $\gamma = 1, 2$ имеют названия методов сопряженных градиентов и сопряженных невязок соответственно (обозначения CG и CR, от Conjugate Gradient и Conjugate Residual, см. [12, 20, 21] и цитируемые там работы). Из приведенных соотношений для $\gamma = 1, 2$ получаем следующие формулы в терминах матриц A и B :

для методов сопряженных градиентов:

$$\begin{aligned} r^0 &= f - Au^0, \quad p^0 = B^{-1}r^0, \quad \alpha_n = \sigma_n/\rho_n, \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n A p^n, \quad p^{n+1} = B^{-1}r^{n+1} + \beta_n p^n, \\ \sigma_n &= (r^n, p^n) = (B^{-1}r^n, r^n), \quad \rho_n = (A p^n, p^n), \quad \beta_n = \sigma_{n+1}/\sigma_n. \end{aligned} \quad (12)$$

для методов сопряженных невязок:

$$\begin{aligned} r^0 &= f - Au^0, \quad \hat{r}^0 = \hat{p}^0 = B^{-1}r^0, \quad \alpha_n = \sigma_n/\rho_n, \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n \hat{p}^n, \quad \hat{r}^{n+1} = \hat{r}^n - \alpha_n B^{-1}A \hat{p}^n, \quad \hat{p}^{n+1} = \hat{r}^{n+1} + \beta_n \hat{p}^n, \\ \sigma_n &= (B^{-1}\hat{r}^n, A \hat{p}^n) = (A \hat{r}^n, \hat{r}^n), \quad \rho_n = (B^{-1}A \hat{p}^n, A \hat{p}^n), \quad \beta_n = \sigma_{n+1}/\sigma_n. \end{aligned} \quad (13)$$

Отметим, что в обоих этих методах на каждой итерации требуется по одному умножению на матрицы A и B^{-1} , а в формулах (13) вектор \hat{r}^n — это не “настоящая”, а предобусловленная невязка, т. е. при точных вычислениях имеем $\hat{r}^n = B^{-1}r^n = B^{-1}(f - Au^n)$, а на каждой итерации при этом минимизируется величина $(B^{-1}r^n, r^n)$. Заменяя вектора $\hat{r}^n = B^{-1}r^n$ и $\hat{p}^n = B^{-1}p^n$, соотношения (13) можно

переписать в терминах обычных невязок r^n :

$$\begin{aligned} p^0 &= r^0 = f - Au^0, \quad n = 0, 1, \dots : \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n B^{-1} p^n, \quad \alpha_n = \sigma_n / \rho_n, \\ r^{n+1} &= r^n - \alpha_n AB^{-1} p^n, \quad \rho_n = (B^{-1} AB^{-1} p^n, AB^{-1} p^n), \\ p^{n+1} &= r^{n+1} + \beta_n p^n, \quad \beta_n = \sigma_{n+1} / \sigma_n, \quad \sigma_n = (B^{-1} AB^{-1} r^n, r^n), \end{aligned}$$

но тогда их реализация потребует дополнительного умножения на матрицу B^{-1} при выполнении каждой итерации. Предобусловленные (pre-conditioned) алгоритмы (12), (13) имеют распространенные обозначения PCG и PCR соответственно.

Один из важных вопросов при реализации методов (12), (13) возникает, когда обращение предобуславливающей матрицы B фактически сводится к итерационному решению соответствующей вспомогательной СЛАУ. При этом допускается конечная невязка и ошибка. Сам итерационный процесс в этом случае становится двухуровневым. Хотя проблема о критериях окончания итераций достаточно тонкая, см. [22], [23], мы для простоты считаем, что в предобусловленных алгоритмах CG и CR внешний процесс останавливается при выполнении условия

$$\|r^n\| \leq \varepsilon_e \|f\|, \quad \varepsilon_e \ll 1. \quad (14)$$

Отметим, что число итераций n_ε , достаточное для выполнения условия (14) при $\varepsilon = \varepsilon_e$ и с точными вычислениями в (12), (13) (включая случай положительно полуопределённой матрицы A), оценивается неравенством

$$n(\varepsilon) \leq \frac{1}{2} \left| \ln \frac{\varepsilon}{2} \right| (\text{cond}_r(B^{-1}A)^{1/2} + 1),$$

где $\text{cond}_r(B^{-1}A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ есть так называемое редуцированное, или эффективное число обусловленности, а λ_{\min} – минимальное ненулевое собственное число матрицы $B^{-1}A$.

На внутренних итерациях поступаем аналогично, выбирая некоторый другой параметр точности $\varepsilon_i \ll 1$. Например, приближённый начальный направляющий вектор \bar{p}^0 определяется из решения системы $B\bar{p}^0 = r^0$ следующим образом:

$$\delta^0 = r^0 - Bp^0, \quad \bar{p}^0 = B^{-1}(r^0 - \delta^0), \quad \|\delta^0\| \leq \varepsilon_i \|r^0\|. \quad (15)$$

Соотношения (15) можно интерпретировать таким образом, что обращение предобуславливающей матрицы B производится приближённым итерационным образом, а δ^0 есть соответствующая невязка “недоитерирования”.

Для метода CG мы проведём анализ возмущений вычисляемых векторов $\bar{u}^n, \bar{r}^n, \bar{p}^n$, предполагая существование на n -ом шаге их некоторых погрешностей, обусловленных в том числе приближённым обращением матрицы B :

$$\bar{u}^n = u^n + z^n, \quad \bar{r}^n = r^n + \varphi^n, \quad \bar{p}^n = p^n + \psi^n. \quad (16)$$

При этом мы предполагаем, что вычисление коэффициентов α_n, β_n и сами арифметические действия выполняются точно. Из (12), (16) для приближённых векторов решений и невязок имеем:

$$\begin{aligned} \bar{u}^{n+1} &= \bar{u}^n + \alpha_n \bar{p}^n = u^{n+1} + z^{n+1}, & z^{n+1} &= z^n + \alpha_n \psi^n, \\ \bar{r}^{n+1} &= \bar{r}^n + \alpha_n A \bar{p}^n = r^{n+1} + \varphi^{n+1}, & \varphi^{n+1} &= \varphi^n + \alpha_n A \psi^n. \end{aligned} \quad (17)$$

Далее, по аналогии с (14), получаем:

$$\begin{aligned} B \bar{q}^{n+1} &= \bar{r}^{n+1}, & \delta^{n+1} &= \bar{r}^{n+1} - B \bar{q}^{n+1}, \\ \bar{q}^{n+1} &= B^{-1}(\bar{r}^{n+1} - \delta^{n+1}) = q^{n+1} + B^{-1}(\varphi^{n+1} - \delta^{n+1}) = \\ &= q^{n+1} + B^{-1}(\varphi^{n+1} - \delta^{n+1}), & \|\delta^{n+1}\| &\leq \varepsilon_i \|r^{n+1}\|. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь в предположении малости возмущений мы считаем, что $\bar{r}^{n+1} \approx r^{n+1}$, а \bar{q}^{n+1} и \tilde{q}^{n+1} означают векторы решений СЛАУ при точном и итерационном обращении матрицы B соответственно. Отсюда направляющие векторы определяются по формулам:

$$\bar{p}^{n+1} = \tilde{q}^{n+1} + \beta_n \bar{p}^n = p^{n+1} + \psi^{n+1}, \quad \psi^{n+1} = B^{-1}(\varphi^{n+1} - \delta^{n+1}) + \beta_n \psi^n. \quad (19)$$

В итоге, из (16)–(18) приходим к неравенствам:

$$\begin{aligned} \|z^{n+1}\| &\leq \|z^n\| + \alpha_n \|\psi^n\|, & \|\psi^{n+1}\| &\leq \|\psi^n\| + \alpha_n \|A\| \cdot \|\psi^n\|, \\ \|\varphi^{n+1}\| &\leq \|B^{-1}\| \cdot \|\varphi^n\| + (\alpha_n \|B^{-1}A\| + \beta_n) \|\psi^n\| + \varepsilon_i \|B^{-1}\| \cdot \|r^{n+1}\|. \end{aligned} \quad (20)$$

Поскольку в (17) $z^0 = \varphi^0 = 0$ и $\|\psi^0\| \leq \varepsilon_i \|r^0\|$, из рекуррентных формул (20) получаем, что все погрешности имеют величину $O(\varepsilon_i)$, если значения $\|B^{-1}\|$ и $\|B^{-1}A\|$, α_n и β_n ограничены, а число итераций n невелико, что мы и предполагаем. Отметим, что хотя выше мы использовали одинаковые значения ε_i для всех внешних итераций, даже в случае приближённого обращения матрицы B с одинаковым количеством внутренних итераций по какому-либо из методов сопряжённых

направлений, предобуславливатели, в общем случае, надо рассматривать как переменные матрицы B_n , а это, в свою очередь, приводит к необходимости перехода к “гибкому” методу сопряжённых градиентов (FCG – Flexible CG) [12] с длинными рекурсиями, что сильно усложняет алгоритм и его исследование. Альтернативой здесь является использование на внутренних итерациях чебышевского ускорения с одинаковыми границами спектра матрицы B и фиксированным порядком многочлена на всех внешних итерациях.

§3. ДЕФЛЯЦИОННЫЕ ПОДХОДЫ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

Пусть $V = (v_1 \dots v_m) \in \mathcal{R}^{N,m}$, $m < N$, есть прямоугольная матрица полного ранга m с линейно независимыми вектор-столбцами v_k . Приближённое решение СЛАУ $Au = f$ можно искать в виде линейной комбинации векторов v_k :

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= u^{-1} + c_1 v_1 + \dots + c_m v_m = u^{-1} + Vc, \quad c \in \mathcal{R}^m, \\ \tilde{r} &= f - A\tilde{u} = r^{-1} - AVc = r^{-1} - Wc, \quad W = AV, \end{aligned} \quad (21)$$

где u^{-1} – произвольный вектор. Коэффициенты c_k будем находить из условия ортогональности невязки \tilde{r} или векторам v_k , т.е.

$$V^T \tilde{r} = 0, \quad \hat{A}\hat{c} \equiv V^T AV\hat{c} = V^T r^{-1}, \quad \hat{c} = \hat{A}^{-1} V^T r^{-1}, \quad (22)$$

или векторам $w_k = Av_k$:

$$W^T \tilde{r} = 0, \quad \check{A}\check{c} \equiv W^T W\check{c} = W^T r^{-1}, \quad \check{c} = \check{A}^{-1} W^T r^{-1}. \quad (23)$$

В последнем случае, \check{c} есть нормальное решение СЛАУ $Wc = r^0$, т.е. минимизирующее невязку \tilde{r} решение наименьшей длины $\|c\| = (c, c)^{1/2}$. Само приближённое решение исходного уравнения и его невязка равны

$$\begin{aligned} \hat{u}^0 &= u^{-1} + V(V^T AV)^{-1} V^T r^{-1} \equiv u^{-1} + \hat{H}r^{-1}, \\ \hat{H} &= V\hat{A}^{-1}V^T, \quad \hat{r}^0 = (I - A\hat{H})r^{-1} \end{aligned} \quad (24)$$

при использовании формул (21) и

$$\begin{aligned} \check{u}^0 &= u^{-1} + V(V^T AAV)^{-1} V^T Ar^{-1} \equiv u^{-1} + \check{H}r^{-1}, \\ \check{H} &= W\check{A}^{-1}W^T, \quad \check{r}^0 = (I - A\check{H})r^{-1} \end{aligned} \quad (25)$$

во втором случае, который фактически представляет собой метод моментов, см. монографии [24, 25], или метод наименьших квадратов,

см. [26, 27]. Матрицы \hat{H} и \check{H} являются малоранговыми приближениями к обратной матрице A^{-1} и, в предельных случаях, $\hat{H} = A^{-1}$ или $\check{H} = A^{-1}$, т.е. мы имеем $\hat{u}^0 = u$ или $\check{u}^0 = u$. В дальнейшем будем также иметь в виду геометрическую интерпретацию соотношений (22), (23): $\tilde{r} \perp \mathcal{V}$ или $\tilde{r} \perp \mathcal{W}$, где введены m -мерные подпространства $\mathcal{V} = \text{Span}\{v_s\}$ и $\mathcal{W} = \text{Span}\{w_s\}$.

Отметим, что в соотношениях (24) и (25) вектор \hat{u} или \check{u} можно формально рассматривать как начальное приближение u^0 в стационарных итерационных процессах с предобуславливающими матрицами $B_1^{-1} = \hat{H}$ и $B_2^{-1} = \check{H}$, которые являются вырожденными в силу условий ортогональности (22) и (23). Также заметим, что матрицы $H_1 = \hat{H}$ и $H_2 = \check{H}$ симметричны, а матрицы $P_i = I - AH_i$, $i = 1, 2$ являются проекторами, т.е.

$$P_i^2 = P_i, \quad (I - P_i)^2 = I - P_i, \quad i = 1, 2.$$

Кроме того, матрицы P_i являются вырожденными, поскольку выполняются равенства $V^T P_1 = 0$ и $W^T P_2 = 0$, т.е. векторы v_s и w_s являются собственными для матриц P_1 и P_2 соответственно (и соответствуют нулевым собственным значениям).

Если векторы v_s или w_s обладают какими-то ортогональными свойствами, то вычисление элементов матриц \hat{H} , \check{H} существенно упрощается. Например, пусть в качестве v_s взяты m первых направляющих векторов p^n из метода CG ($\gamma = 1$, формулы (12)), являющихся A -ортогональными. Тогда в (22), (24) получим:

$$\hat{A} = V^T AV = R_1 = \text{diag}\{\rho_s^{(1)} = (v_s, Av_s)\}. \quad (26)$$

В другом случае, когда v_s суть направляющие векторы из метода CR (13), для формул (23), (25) будем иметь:

$$\check{A} = W^T W = R_2 = \text{diag}\{\rho_s^{(2)} = (w_s, Aw_s)\}. \quad (27)$$

Отсюда следует, в частности, что если в (21) положить $u^{-1} = u^0$, где u^0 – вектор начального приближения из (12) или (13), то компоненты \hat{c}_s и \check{c}_s векторов \hat{c} и \check{c} из (22), (23) будут равняться коэффициентам α_s , $s = 0, 1, \dots, m$, из (12) или (13) соответственно.

На основе дополнения подпространств Крылова (8) векторами v_s или w_s строятся предобусловленные дефляционные алгоритмы сопряжённых направлений (PDCD – Preconditioned Deflated Conjugate Direction), в которых векторы направлений и невязок обладают расширенными ортогональными свойствами. Описание метода сопряжённых

градиентов PDCG, соответствующего $\gamma = 1$, мы приведём, следуя [17], с использованием оператора проектирования A -ортогонального дополнения $\mathcal{V}^{\perp A}$ на \mathcal{V} вдоль \mathcal{V} :

$$Q_1 = I - V\hat{A}^{-1}V^T A, \quad \hat{A} = V^T AV. \quad (28)$$

Формулы данного алгоритма записываются в виде

$$\begin{aligned} u^0 &= \hat{u}^0, \quad r^0 = f - Au^0, \\ p^0 &= q^0 = Q_1 B^{-1} r^0; \quad n = 0, 1, \dots : \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n A p^n, \\ \alpha_n &= (p^n, r^n) / (A p^n, p^n) = (B^{-1} r^n, r^n) / (A p^n, p^n), \\ q^{n+1} &= Q_1 B^{-1} r^{n+1}, \quad p^{n+1} = q^{n+1} + \beta_n p^n, \\ \beta_n &= -(q^{n+1}, A p^n) / (A p^n, p^n) = (B^{-1} r^{n+1}, r^{n+1}) / (B^{-1} r^n, r^n). \end{aligned} \quad (29)$$

Определяемые здесь векторы обладают следующими свойствами ортогональности:

$$\begin{aligned} V^T r^k &= 0, \quad V^T A p^k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n; \\ (r^n, p^k) &= 0, \quad (r^n, B^{-1} r^k) = 0, \quad (p^n, A p^k) = 0, \quad k < n. \end{aligned} \quad (30)$$

Получаемая при этом ошибка итерационного приближения $z^n = u - u^n$ ортогональна подпространству $\mathcal{U} = \text{Span} \left\{ \mathcal{V}, \hat{Q} \mathcal{K}_n(B^{-1} r^0, B^{-1} A \hat{Q}) \right\}$, а её норма $\|u - u^n\|_A = (A^{-1} r^n, r^n)$ достигает минимума в этом подпространстве.

Для предобусловленного дефляционного метода сопряжённых невязок PDCR рассмотрение может быть проведено аналогичным образом. В этом случае, строится оператор A^2 -ортогонального проектирования

$$Q_2 = I - Q A_2^{-1} W^T A, \quad A_2 = W^T A W, \quad (31)$$

а сам итерационный процесс строится по формулам (13), в которых u^0 заменяется на \hat{u}^0 , а матрица B^{-1} – на произведение $Q_2 B^{-1}$. При этом векторы невязок и направлений вместо условий (30) удовлетворяют следующим соотношениям ортогональности:

$$\begin{aligned} W^T r^k &= 0, \quad W^T A p^k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n; \\ (r^n, A p^k) &= 0, \quad (r^n, A B^{-1} r^k) = 0, \quad (A p^n, A p^k) = 0, \quad k < n. \end{aligned} \quad (32)$$

Отметим, что рассмотренные проекторы обладают свойствами

$$A Q_i = Q_i^T A = Q_i^T A Q_i = \bar{A}_i, \quad i = 1, 2, \quad (33)$$

а порождаемые ими предобусловленные дефляционные методы сопряжённых направлений могут быть интерпретированы как результат двустороннего предобуславливания с матрицами Q_i^T и Q_i в соответствии с (33), при этом сами матрицы \bar{A}_i являются вырожденными. В частности, если в качестве v_1, \dots, v_m в (21) взять собственные векторы матриц A_i , соответствующие m минимальным собственным числам $0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_m$, то эффективные числа обусловленности матриц \bar{A}_i будут оцениваться следующими величинами (см. [15]):

$$\text{cond}_r(\bar{A}_i) \leq \lambda_{\max}(\bar{A}_i) / \lambda_{m+1}(\bar{A}_i).$$

Один из основных подходов к выбору дефляционных векторов v_s из представления (21) заключается в использовании приближённых собственных векторов матрицы СЛАУ, которые могут быть построены в процессе выполнения итераций методов сопряжённых направлений.

В методах CD для решения системы (1) при $\gamma = 1$ или $\gamma = 2$ из формул (4), (9) (в которых опускается верхняя черта над \bar{A} и \bar{r}^n) получаются следующие трёхчленные соотношения для векторов невязки (здесь и далее индекс “ γ ” у векторов и коэффициентов для краткости опускаем):

$$\begin{aligned} Ar^1 &= \alpha_1^{-1}r^1 - \alpha_2^{-1}r^2, \quad n = 2, 3, \dots : \\ Ar^n &= -\frac{\beta_{n-1}}{\alpha_{n-1}}r^{n-1} + \left(\frac{1}{\alpha_n} + \frac{\beta_{n-1}}{\alpha_{n-1}}\right)r^n - \frac{1}{\alpha_n}r^{n+1}. \end{aligned} \quad (34)$$

Тогда, как легко проверить, нормализованные векторы невязки

$$\tilde{r}^n = r^n / \|r^n\|_{\gamma-1}, \quad \|r^n\|_{\gamma-1}^2 = (r^n, r^n)_{\gamma-1} = \sigma_n,$$

удовлетворяют соотношению

$$AR_n = R_n T_n - \nu_n \tilde{r}^{n+1} e_{n+1}^T, \quad (35)$$

где $e_{n+1} = (0 \dots 01)$ есть орт-строка в \mathcal{R}^{n+1} , $R_n = [\tilde{r}^0 \dots \tilde{r}^n] \in \mathcal{R}^{N, n+1}$, а $T_n \in \mathcal{R}^{n+1, n+1}$ есть симметричная трёхдиагональная матрица вида

$$T_n = \begin{bmatrix} \mu_0 & -\nu_0 & 0 & \dots & 0 \\ -\nu_0 & \mu_1 & -\nu_1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\nu_{n-2} & \mu_{n-1} & -\nu_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & -\nu_{n-1} & \mu_n \end{bmatrix}, \quad (36)$$

элементы которой равны

$$\mu_0 = \alpha_0^{-1}, \quad \mu_n = \alpha_n^{-1} + \beta_{n-1}/\alpha_{n-1}, \quad \nu_n = \sqrt{\beta_n}/\alpha_n. \quad (37)$$

Умножая уравнение (35) слева на матрицу $R_n^T A^\gamma$, в силу условий ортогональности (10) для невязок, получаем матричное равенство

$$T_n = R_n^T A^\gamma A R_n \in \mathcal{R}^{n+1, n+1},$$

т.е. матрица T_n является малоранговым приближением к матрице $A^{\gamma+1}$.

Пусть λ_k и z_k , $k = 1, \dots, n+1$ – собственные числа и векторы матрицы T_n , т.е.

$$T_n z_k = \lambda_k z_k, \quad z_k \in \mathcal{R}^{n+1}.$$

Тогда векторы $v_k = R_n z_k \in \mathcal{R}^N$ и скалярные величины

$$\nu_k = (Aw_k, w_k)/(w_k, w_k)$$

называются векторами и числами Ритца матрицы A .

В работах многих авторов векторы v_k , соответствующие $m \leq n$ минимальным числам Ритца матрицы A , используются в качестве дефляционных, см. выше (21).

Отметим, что при построении трёхдиагональной матрицы T_n типа (34), являющейся в определённом смысле аппроксимацией матрицы $A^{\gamma+1}$, можно использовать и другие последовательности ортогональных векторов, например, p^n или Ap^n , также образующих трёхчленные рекурсии.

Мы остановимся несколько подробнее на применении данного варианта дефляционного алгоритма для двукратного решения СЛАУ вида (1) с различными правыми частями f^1, f^2 . Пусть первая алгебраическая система решена с помощью метода CG или CR за n_1 итераций. Для простоты эти алгоритмы рассматриваем без предобуславливания, т.е. $B = I$ в формулах (12), (13), при этом вектор полученного численного решения обозначаем через u^{n_1} , а значение $\gamma = 1$ или $\gamma = 2$, соответствующее методу CG и CR, определяем далее по контексту.

Пусть теперь для решения второй СЛАУ (методом CG или CR) u^{-1} будет произвольный вектор начального приближения. До начала итерационного процесса проведём коррекцию, или дефляцию начального приближения, а также вектора начальной невязки по формулам вида (21):

$$\begin{aligned} u^0 &= u^{-1} + c_0 p^0 + \dots + c_{m-1} p^{m-1} = u^{-1} + Pc, \quad c \in \mathcal{R}^m, \\ r^0 &= r^{-1} - c_0 Ap^0 - \dots - c_{m-1} Ap^{m-1} = r^{-1} - APc, \quad P \in \mathcal{R}^{N, m}, \end{aligned} \quad (38)$$

где $r^{-1} = f^2 - Au^{-1}$, а p^0, \dots, p^{m-1} , $m \leq n_1$, суть направляющие векторы, вычисленные при решении первой СЛАУ.

Для нахождения неизвестного вектора коэффициентов c можно использовать два различных условия ортогональности для вектора r^0 :

$$P^T r^0 = 0 : c = c^{(1)} = A_1^{-1} P^T r^{-1}, \quad A_1 = P^T A P, \quad (39)$$

$$u^0 = u^{-1} + P c^{(1)}, \quad r^0 = r^{-1} - Q c^{(1)}, \quad Q = A P;$$

$$Q^T r^0 = 0 : c = c^{(2)} = A_2^{-1} Q^T r^{-1}, \quad A_2 = Q^T Q, \quad (40)$$

$$u^0 = u^{-1} + P c^{(2)}, \quad r^0 = r^{-1} - Q c^{(2)} = (I - Q A_2^{-1} Q^T) r^{-1}.$$

Отметим, что в (39) $A_1 = \hat{A}$, $c^{(1)} = \hat{c}$ (см. (22)), если $p^s = v^s$ вычислены по методу CG, а в (40) $A_2 = \check{A}$, $c^{(2)} = \check{c}$ (см. (23)), если направляющие векторы $p^s = v^s$ определены по методу CR. Более того, в этих случаях указанные матрицы являются диагональными в соответствии с (26), (27). При этом условия ортогональности для r^0 в (39), (40) аналогичны тем свойствам векторов невязок r^n , которыми они обладают в методах CG и CR соответственно. Для методов сопряжённых направлений существует некоторый произвол при выборе начального направляющего вектора p^0 . Здесь рассмотрим три возможных различных условия ортогональности, которые легко обеспечить перед началом итерирования второй СЛАУ:

$$P^T A p^0 = 0 : p^0 = r^0 - P \bar{c}^{(1)}, \quad \bar{c}^{(1)} = A_1^{-1} P^T A r^0, \quad (41)$$

$$P^T A A p^0 = 0 : p^0 = r^0 - P A_2^{-1} P^T A A r^0, \quad (42)$$

$$Q^T A p^0 = 0 : p^0 = r^0 - Q c^{(3)}, \quad c^{(3)} = A_3^{-1} Q^T r^0, \quad A_3 = Q^T A Q. \quad (43)$$

Можно показать, что определённая в (43) матрица $A_3 = P^T A^3 P$ является трёхдиагональной, если направляющие векторы p^k определяются из решения первой СЛАУ по формулам (13) метода CR. Более того, она симметризуется к виду $\bar{A}_3 = \bar{P}^T A^3 \bar{P} = \bar{Q}^T A \bar{Q}$, если векторы p^k и $q^k = A p^k$ нормировать следующим образом: $\bar{q}^k = q^k / \|q^k\|$, $\bar{p}^k = p^k / \|p^k\|$. Действительно, вводя в (13) при $B = I$ обозначения $\hat{r}^n = r^n$, $q^n = A p^n$, мы получаем соотношения

$$\begin{aligned} A r^{n+1} &= A r^n - \alpha_n A q^n, \\ q^{n+1} &= A r^{n+1} = \beta_n q^n, \end{aligned}$$

из которых следует трёхчленная рекурсия

$$A q^n = -(\beta_{n-1} q^{n-1} + (1 + \beta_n) q^n - q^{n+1}) / \alpha_n. \quad (44)$$

Подставляя в (44) выражения $\alpha_n = \sigma_n/\rho_n$, $\beta_n = \sigma_{n+1}/\sigma_n$ из (13) и вводя ортонормированные векторы $\bar{q}^n = q^n/\|q^n\| = q^n/\rho_n^{1/2}$, вследствие $\bar{Q}^T Q = I$ получаем

$$A\bar{q}^n = -\frac{(\rho_{n-1}\rho_n)^{1/2}}{\sigma_{n-1}}\bar{q}^{n-1} + \frac{\rho_n^{1/2}}{\sigma_n}(1 + \beta_n)\bar{q}^n - \frac{(\rho_n\rho_{n+1})^{1/2}}{\sigma_n}\bar{q}^{n+1}, \quad (45)$$

$$A\bar{Q} = \bar{Q}T,$$

$$T = 3 - \text{diag} \left\{ -\frac{(\rho_{n-1}\rho_n)^{1/2}}{\sigma_{n-1}} \frac{\rho_n^{1/2}}{\sigma_n} (1 + \beta_n) - \frac{(\rho_n\rho_{n+1})^{1/2}}{\sigma_n} \right\} = T^T = \bar{A}_3. \quad (46)$$

Заметим, что в (41), (42) условия ортогональности аналогичны тем, которым удовлетворяют направляющие векторы в формулах (12), (13) для методов CG и CR соответственно. Отметим, что в (42) и (43) условия на p^0 совпадают. Но в первом случае формулы коррекции p^0 проще. Анализ формул (41), (42) показывает, что можно записать дефляционные методы сопряжённых направлений, обеспечивающие свойства ортогональности направляющих векторов $P^T A p^n$ – для DCG ($\gamma = 1$) и $P^T A A p^n$ – для DCR ($\gamma = 2$) на всех итерациях, в следующем едином образном виде:

$$\begin{aligned} r^0 &= r^{-1} - P A A_\gamma^{-1} P^T A^{\gamma-1} r^{-1}, \\ p^0 &= r^0 - P A_\gamma^{-1} P^T A^\gamma r_0, \quad A_\gamma = P^T A^\gamma P, \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n A p^n, \quad \alpha_n = \sigma_n/\rho_n, \\ p^{n+1} &= r^{n+1} + \beta_n p^n - P A_\gamma^{-1} P^T A^\gamma r^{n+1}, \quad \beta_n = \sigma_{n+1}/\sigma_n, \\ \sigma_n &= (A^{\gamma-1} r^n, r^n), \quad \rho_n = (A^\gamma p^n, p^n) \end{aligned} \quad (47)$$

§4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Мы приведём и обсудим результаты численных экспериментов по применению некоторых из рассмотренных дефляционных подходов для методов сопряжённых градиентов DCG. Расчёты проводились на модельных сеточных СЛАУ, полученных из стандартных пятиточечных аппроксимаций второго порядка на квадратных сетках с числом ячеек $N \times N$ для двумерного уравнения Пуассона с граничными условиями Дирихле в квадратной области $\Omega = [0, 1]^2$, см. [1]. В каждом из экспериментов расчёты проводились для двух алгебраических систем с одинаковыми матрицами и разными правыми частями, полученных

при различных краевых условиях в дифференциальных задачах. Правая часть первой СЛАУ соответствует точному решению уравнения Пуассона $u(x, y) = 1$, при этом начальное приближение для итерационного процесса в узлах сетки ($x_i = ih$, $y_j = jh$, $h = 1/N$) брались равным $u^0 = \{u_{i,j}^0 = x_i^2 + y_j^2\}$. Для второй СЛАУ правая часть определялась из точного решения задачи Дирихле $u(x, y) = x^2 + y^2$, а начальное приближение полагалось нулевым (в формулах (24), (25) данные начальные векторы обозначаются через u^{-1}). Все расчёты проводились со стандартной двойной точностью на последовательно сгущающихся сетках с числом узлов $N^2 = 8^2, 16^2, 32^2, \dots, 256^2, 512^2$. Параметр окончания итераций вида (14) везде брался $\varepsilon = 10^{-7}$.

Для сравнения эффективности различных алгоритмов мы приводим только количества итераций $n(\varepsilon)$. Анализ производительности различных вариантов методов дефляций следует проводить по временам выполнения алгоритмов с масштабируемым распараллеливанием на разных конфигурациях МВС, что в данной работе не рассматривается.

В Таблице 1 приводятся результаты серии расчётов для метода CG при решении второй СЛАУ с использованием в качестве дефляционных векторов v^s из (21) направляющих A -ортогональных векторов p^n метода CG из (12) при $B = I$, полученных во время решения первой СЛАУ (число итераций для первой СЛАУ обозначено через n_1). Дефляционный подход DCG для второй СЛАУ реализовывался либо только для начального приближения и вектора начальной невязки, коррекция которых осуществлялась по формулам (24), либо по формулам (29) с полным набором направляющих векторов p^n вектор-столбцов в матрице V из (28), полученных из решения первой СЛАУ методом CG (соответствующие числа итераций при решении второй СЛАУ обозначены через n_2 , n_3). Дополнительно в последних двух строках этой таблицы приведены значения квадратов норм исходной и откорректированной невязок $\|r^{-1}\|$, $\|r^0\|$ перед итерационным решением второй СЛАУ.

В заключение можно сказать, что предложенные в работе для дефляционных методов сопряжённых градиентов и сопряжённых невязок подходы с выбором направляющих векторов в качестве базисов, расширяющих пространства Крылова и ортогональных в соответствующих метриках, являются перспективными, в силу своей экономичности и естественной параллелизуемости, для актуальной проблемы

Таблица 1. Количества итераций для метода CG при $\varepsilon = 10^{-7}$:

n_1 – решение первой СЛАУ без дефляции;

n_2 – решение второй СЛАУ с дефляцией только начального приближения и начальной невязки;

n_3 – решение второй СЛАУ с дефляцией с полным набором направляющих векторов.

N	8	16	32	64	128	256	512
n_1	20	42	83	161	314	610	1185
n_2	10	26	53	96	190	351	745
n_3	1	17	36	73	144	271	538
$\ r^{-1}\ ^2$	2.4	4.6	8.8	17.1	33.7	66.8	132.9
$\ r^0\ ^2$	$3.5 \cdot 10^{-2}$	1.7	3.8	7.2	13.5	25.5	49.3

многократного решения СЛАУ с одинаковыми матрицами, но с разными последовательно определяемыми правыми частями. В литературе имеется достаточно много различных методик, требующих для качественного сравнительного анализа различных алгоритмов дополнительных исследований как теоретического, так и экспериментального характера, что и является ближайшей целью авторов. Специального рассмотрения требуют вопросы распараллеливания дефляционных алгоритмов, поскольку введение большого количества дополнительных векторов значительно увеличивает трудоёмкость каждой итерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В. П. Ильин, *Математическое моделирование. Часть 1. Непрерывные и дискретные модели.* Изд. СО РАН, Новосибирск, 2017.
2. R. Nicolaides, *Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems.* — SIAM J. Numer. Anal. **24** (1987), 355–365.
3. Z. Dostal, *Conjugate gradient method with preconditioning by projector.* — Int. J. Computer Math. **23** (1988), 315–323.
4. L. Mansfield, *On the use of deflation to improve the convergences of conjugate gradient iteration.* — Commun. Appl. Numer. Math. **4** (1998), 151–156.
5. L. Mansfield, *Damped Jacobi preconditioning and coarse grid deflation for conjugate gradient iteration on parallel computers.* — SIAM J. Sci. Stat. Comput. **12** (1991), 1314–1323.
6. A. Gaul, M. H. Gutknecht, J. Liesen, R. Nabben, *A framework for deflated and augmented Krylov subspace methods.* — SIAM J. Anal. Appl. **34** (2013), 495–518.

7. M. H. Gutknecht, *Deflated and augmented Krylov subspace methods: A framework for the deflated BiCG and related solvers*. — SIAM J. Matrix Appl. **35** (2014), 1444–1466.
8. K. Ahuja, E. Sturler, L. Feng, *Recycling BiCG STAB with an application to parametric model order reduction*. — SIAM J. Sci. Comput. **37** (2015), 429–446.
9. M. P. Neuenhofen, C. Greif, *MSTAB: Stabilized inducted dimension reduction for KRYLOV subspace recycling*. — SIAM J. Sci. Comput. **40**, No. 2 (2018), 554–571.
10. R. Nabben, C. Vuik, *A comparison of deflation and coarse grid correction applied to porous media flow*. — SIAM J. Numer. Anal. **42** (2004), 631–647.
11. J. M. Tang, R. Nabben, C. Vuik, Y. A. Erlangga, *Comparison of two-level preconditioners derived from deflation, domain decomposition and multigrid methods*. — J. Sci. Comput. **39** (2009), 340–370.
12. Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd edn. SIAM, 2003.
13. Y. Saad, M. Yeung, J. Erhel, F. Guyomarc’h, *A deflated version of conjugate gradient algorithm*. — SIAM J. Sci. Comput. **24** (2000), 1909–1926.
14. V. Simoncini, D. B. Szyld, *Recent computational developments in Krylov subspace methods for linear systems*. — Numer. Linear. Algebra Appl. **14** (2007), 1–39.
15. J. I. Aliaga, D. L. Boley, R. W. Freund, V. Hernandez, *A Lanczos-type method for multiple starting vectors*. — Math. Comp. **69** (2000), 1577–1601.
16. J. Erhel, F. Guyomarc’h, *An augmented conjugate gradient method for solving consecutive symmetric positive definite linear systems*. — SIAM J. Matrix Anal. Appl. **21** (2000), 1279–1299.
17. Л. Ю. Колотилина, *Переобуславливание систем линейных алгебраических уравнений с помощью двойного исчерпывания. I. Теория*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **229** (1995), 95–152.
18. N. Venkovic, P. Mucek, L. Giraud, O. Le Maitre, *Comparative study of harmonic and Rayleigh–Ritz procedures with applications for deflated conjugate gradients*. — Pressed Report Cerfacs, 2020. hal-02434043
19. В. П. Ильин, *О проблемах параллельного решения больших СЛАУ*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **439** (2015), 112–127.
20. В. П. Ильин, *Методы и технологии конечных элементов*. Изд. ИВМ и МГ СО РАН, Новосибирск, 2007.
21. M. A. Olshanskii, E. E. Tyrtshnikov, *Iterative Methods for Linear Systems. Theory and Applications*. SIAM, Philadelphia, 2014.
22. M. Arioli, *Generalized Golub–Kahan diagonalization and stopping criteria*. — SIAM J. Matrix Anal. Appl. **34**, No. 2 (2013), 57–592.
23. N. J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. SIAM, Philadelphia, 2002.
24. Ю. В. Воробьев, *Метод моментов в прикладной математике*. Физматлит, М., 1958.
25. J. Liesen, Z. Strakos, *Krylov Subspace Methods, Principles and Analysis*. Oxford University Press, 2013.
26. Я. Л. Гурьева, В. П. Ильин, *О методах грубосеточной коррекции в подпространствах Крылова*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **463** (2017), 44–57.
27. В. П. Ильин, *Двухуровневые методы наименьших квадратов в подпространствах Крылова*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **463** (2017), 224–239.

Gurieva Y. L., Il'in V. P. Conjugate direction methods for multiple solution of SLAEs.

Conjugate gradient and conjugate residual methods for multiple solution of systems of linear algebraic equations (SLAE) with the same matrices but with different successively determined right-hand sides are considered. In order to speed up the iterative processes when solving the second and subsequent SLAEs, deflation algorithms are applied. These algorithms use the direction vectors obtained in the course of solving the first system as the basis vectors. Results of numerical experiments for model examples, illustrating the efficiency of the approaches under consideration, are provided.

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН
E-mail: yana@apasrv.sccc.ru

Поступило 23 октября 2020 г.

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет
E-mail: ilin@sccc.ru