Метод сопряженных градиентов

Алгоритм классического метода сопряженных градиентов для системы уравнений

$$Ax = f \tag{1}$$

с симметричной матрицей A может быть записан следующим образом.

Выбирается начальное приближение x^0 и полагается

$$r^0 = f - Ax^0, \tag{2}$$

$$z^0 = r^0. \tag{3}$$

Далее для $k = 1, 2, \ldots$ производятся следующие вычисления:

$$\alpha_k = \frac{\left(r^{k-1}, r^{k-1}\right)}{\left(Az^{k-1}, z^{k-1}\right)}, \tag{4}$$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k z^{k-1}, \tag{5}$$

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_k A z^{k-1}, \tag{6}$$

$$\beta_k = \frac{\left(r^k, r^k\right)}{\left(r^{k-1}, r^{k-1}\right)}, \tag{7}$$

$$z^k = r^k + \beta_k z^{k-1}, \tag{8}$$

где x^0 – вектор начального приближения; x^k – вектор решения на k-й (текущей) итерации; r^k – вектор невязки на k-й (текущей) итерации; z^k – вектор спуска (сопряженное направление) на k-й итерации; α_k, β_k – коэффициенты.

Выход из итерационного процесса (4)–(8) осуществляется либо по условию малости относительной невязки:

$$\frac{\left\| r^k \right\|}{\left\| f \right\|} < \varepsilon, \tag{9}$$

либо (аварийно) по превышению максимально допустимого числа итераций.

Для ускорения сходимости итерационных методов обычно используют *предобусловливание* матрицы системы. Одним из методов предобусловливания является так называемый *метод неполной факторизации* матрицы. Он заключается в том, что подбирается такая матрица M, что $M^{-1} \approx A^{-1}$, и при этом процедура решения СЛАУ вида $Mq = p$ является не слишком трудоёмкой. Нетрудно показать, что для симметричной положительно определённой матрицы $M = SS^{\mathrm{T}}$ итерационный процесс (2)–(8) можно применить к предобусловленной матрице $S^{-1}AS^{-\mathrm{T}}$ и представить в виде:

$$r^0 = f - Ax^0, \tag{10}$$

$$z^0 = M^{-1} r^0. \tag{11}$$

Далее для $k = 1, 2, \ldots$ производятся следующие вычисления:

$$\alpha_k = \frac{\left(M^{-1} r^{k-1}, r^{k-1}\right)}{\left(Az^{k-1}, z^{k-1}\right)}, \tag{12}$$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k z^{k-1}, \tag{13}$$

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_k A z^{k-1}, \tag{14}$$

$$\beta_k = \frac{\left(M^{-1} r^k, r^k\right)}{\left(M^{-1} r^{k-1}, r^{k-1}\right)}, \tag{15}$$

$$z^k = M^{-1} r^k + \beta_k z^{k-1}. \tag{16}$$

Рассмотрим два способа построения матрицы неполной факторизации.

Для *диагонального* предобусловливания выбирается $M = D$, где D – главная диагональ матрицы A.

Для предобусловливания *неполным разложением Холесского* выбирается $M = SS^{\mathrm{T}}$, которая строится по формулам полного разложения Холесского с условием, что портрет нижнетреугольной матрицы S совпадает с портретом матрицы A, то есть все ненулевые элементы, которые должны были бы получиться на месте нулевых (по портрету) элементов матрицы A, принудительно задаются равными нулю.

Заметим, что в выражениях (15) и (16) не требуется построение матрицы M^{-1}, а предполагается решать СЛАУ $Mq^k = r^k$, где q^k – некоторый вспомогательный вектор.

Применение МСГ для СЛАУ с несимметричной матрицей

Если необходимо решать СЛАУ с несимметричной матрицей, то одним из вариантов (часто далеко не самым лучшим) может быть следующий. Так как метод сопряженных градиентов применим только для симметричных матриц, то несимметричную систему уравнений $Ax = f$ необходимо преобразовать к СЛАУ с симметричной матрицей. Это можно сделать, умножив слева систему уравнений на матрицу A^{T} (безусловно, итерационная процедура должна строиться так, чтобы не было необходимости хранить матрицу $A^{\mathrm{T}}A$). Рассмотрим итерационную процедуру для предобусловленной конечноэлементной СЛАУ $By = g$, построенную на основе метода сопряженных градиентов. Итак, вместо исходной конечноэлементной СЛАУ $Ax = f$ будем решать СЛАУ $By = g$, в которой

$$B = \left(L^{-1} A U^{-1}\right)^{\mathrm{T}} L^{-1} A U^{-1} = U^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} L^{-\mathrm{T}} L^{-1} A U^{-1},$$

$$y = Ux, \qquad g = U^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} L^{-\mathrm{T}} L^{-1} f,$$

где матрицы L и U соответственно нижняя треугольная и верхняя треугольная матрицы неполной факторизации исходной матрицы A.

Тогда формулы метода сопряженных градиентов (2)–(8) преобразуются к следующему виду. Выбирается начальное приближение x^0 и полагается

$$\tilde{r}^0 = U^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} L^{-\mathrm{T}} L^{-1} f - U^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} L^{-\mathrm{T}} L^{-1} A U^{-1} U x^0 = U^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} L^{-\mathrm{T}} L^{-1} \left(f - Ax^0\right) \tag{17}$$

$$\tilde{z}^0 = \tilde{r}^0, \ \tilde{x}^0 = Ux^0. \tag{18}$$

Далее для $k = 1, 2, \ldots$ производятся следующие вычисления:

$$\tilde{\alpha}_k = \frac{\left(\tilde{r}^{k-1}, \tilde{r}^{k-1}\right)}{\left(U^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} L^{-\mathrm{T}} L^{-1} A U^{-1} \tilde{z}^{k-1}, \tilde{z}^{k-1}\right)}, \tag{19}$$

$$\tilde{x}^k = \tilde{x}^{k-1} + \tilde{\alpha}_k \tilde{z}^{k-1}, \tag{20}$$

$$\tilde{r}^k = \tilde{r}^{k-1} - \tilde{\alpha}_k U^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} L^{-\mathrm{T}} L^{-1} A U^{-1} \tilde{z}^{k-1}, \tag{21}$$

$$\tilde{\beta}_k = \frac{\left(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k\right)}{\left(\tilde{r}^{k-1}, \tilde{r}^{k-1}\right)}, \tag{22}$$

$$\tilde{z}^k = \tilde{r}^k + \tilde{\beta}_k \tilde{z}^{k-1}. \tag{23}$$

По окончании итерационного процесса вектор решения вычисляется следующим образом:

$$x = U^{-1} \tilde{x}. \tag{24}$$