

Министерство образования и науки Российской Федерации
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Физтех-школа прикладной математики и информатики
Кафедра вычислительных технологий и моделирования в геофизике и биоматематике

Выпускная квалификационная работа бакалавра

Блочные методы типа бисопряжённых градиентов

Автор:

Студент 101а группы
Козлов Николай Андреевич

Научный руководитель:

н.с.,к.ф.-м.н.
Желтков Дмитрий Александрович



Москва 2025

Аннотация

Блочный BiCGStab и его друзья
Козлов Николай Андреевич

Краткое описание задачи и основных результатов, мотивирующее
прочитать весь текст.

Abstract

Block BiCGStab and his friends

Содержание

1	Введение	4
2	Крыловские методы решения систем уравнений	5
2.1	Метод сопряженных градиентов	5
2.2	Метод бисопряженных градиентов	5
2.3	Стабилизированный метод бисопряженных градиентов	5
2.4	Блочный метод сопряженных градиентов	5
2.5	Блочный метод бисопряженных градиентов	5
2.6	Блочный стабилизированный метод бисопряженных градиентов	5
2.6.1	Матричнозначные полиномы	5
2.6.2	Алгоритм	5
3	Улучшения блочного метода стабилизированных бисопряженных градиентов	6
3.1	Реортогонализация для поддержания биортогональных соотношений . .	6
3.2	Ортогонализация векторов направлений и проверочных невязок	7
3.3	Выбор правых частей	8
3.4	Алгоритм	8
3.5	Проблемы	8
4	Численные эксперименты	10
5	Заключение	13

1 Введение

В ряде приложений возникают большие линейные системы с многими правыми частями. такую задачу можно записать в блочном виде:

$$\begin{array}{c} \overbrace{\hspace{1.5cm}}^N \\ \left[\begin{array}{c} \boxed{A} \end{array} \right]_N = \begin{array}{c} \overbrace{\hspace{1.5cm}}^s \\ \left[\begin{array}{c} x_1 \dots x_s \end{array} \right] \end{array} = \begin{array}{c} \overbrace{\hspace{1.5cm}}^s \\ \left[\begin{array}{c} b_1 \dots b_s \end{array} \right] \end{array} \end{array}$$

$$AX = B,$$

где A - $N \times N$ невырожденная разреженная матрица системы; B - $N \times s$ невырожденная матрица, столбцы - правые части; X - $N \times s$ матрица, столбцы - решения для соответствующих правых частей. Также еще предполагаем, что $s \ll N$. Такие задачи можно решать прямыми методами, однако они не подходят для больших задач из-за кубической асимптотики. Так что естественным является использование блочных крыловских методов.

В преимущества блочных крыловских методов входят: высокая производительность на вычислительных системах за счет блочных операций, Более быстрая сходимость, по сравнению с неблочными методами [DIANNE O'LEARY]; в задачах со структурированными системами (например МКЭ) БКМ не разрушают структуру, в отличие от прямых методов. Чрезвычайно большие системы, которые не помещаются целиком в оперативную память можно решать с помощью блочных крыловских методов.

<Рассказ про блочные крыловские методы.>

Для наших целей мы хотим построить крыловские методы, отвечающие следующим требованиям: методы должны находить решения систем общего вида, то есть, которые не обязательно являются эрмитовыми; методы не должны требовать сохранения всего крыловского пространства, то есть должны давать короткие итерационные соотношения; методы должны поддерживать оптимальный размер блока.

2 Крыловские методы решения систем уравнений

Здесь надо рассмотреть все существующие решения поставленной задачи, но не просто пересказать, в чем там дело, а оценить степень их соответствия тем ограничениям, которые были сформулированы в постановке задачи.

2.1 Метод сопряженных градиентов

[YOUSEF SAAD ITERATIVE METHODS FOR SPARSE LINEAR SYSTEMS SECOND EDITION]

2.2 Метод бисопряженных градиентов

[YOUSEF SAAD ITERATIVE METHODS FOR SPARSE LINEAR SYSTEMS SECOND EDITION]

2.3 Стабилизированный метод бисопряженных градиентов

[1]

2.4 Блочный метод сопряженных градиентов

[2]

2.5 Блочный метод бисопряженных градиентов

[2]

2.6 Блочный стабилизированный метод бисопряженных градиентов

[3]

2.6.1 Матричнозначные полиномы

Проблемы со сходимостью метода из [3], демонстрация в 4 главе, решение проблемы в 3 главе.

2.6.2 Алгоритм

3 Улучшения блочного метода стабилизированных бисопряжённых градиентов

В данной главе предложены изменения, направленные на улучшение стабильности блочного метода бисопряжённых градиентов.

3.1 Реортогонализация для поддержания биортогональных соотношений

Для построения базиса в крыловском пространстве и построения невязок алгоритм строится таким образом, чтобы поддерживать следующие соотношения ортогональности:

$$C(\mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1}) = 0, \quad (1)$$

$$C^{(1)}(\mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k) = 0. \quad (2)$$

Для построения процедуры реортогонализации эти полиномиальные соотношения необходимо перевести в матричный вид. Используя полиномиальное соотношение для \mathbf{R}_{k+1} , получаем:

$$\mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1} = \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k - t \mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k \alpha_k \implies S_k = R_k - A P_k \alpha_k$$

Тогда выражение (1) можно представить в виде:

$$\tilde{R}_0^* S_k = 0. \quad (3)$$

В точной арифметике это соотношение выполняется строго, однако при вычислениях на компьютере соотношение (3) выполняется с какой-то погрешностью. Для существенного уменьшения этой погрешности можно произвести ортогонализацию еще раз, взяв S_k в качестве блока, к которому производится ортогонализация:

$$S_k^r = S_k - A P_k \alpha_k^r. \quad (4)$$

При этом мы стремимся поддерживать соотношение $\tilde{R}_0^* S_k^r = 0$ с уточненным блоком S_k^r . Тогда, домножая обе части выражения (4) слева на \tilde{R}_0 , получим уравнение для поправки α_k^r :

$$(\tilde{R}_0^T A P_k) \alpha_k^r = \tilde{R}_0^T S_k.$$

Поработаем теперь над выражением (2). Используя полиномиальное соотношение для P_{k+1} , получаем следующее выражение:

$$t \mathbf{Q}_k \mathbf{P}_{k+1} = t \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1} + t \mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k. \quad (5)$$

Введем обозначение $W_k \equiv (t \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1})(A) \circ R_0$. Тогда выражение (5) можно записать в матричном виде:

$$W_k = A S_k + A P_k \beta_k. \quad (6)$$

Тогда выражение (2) можно представить в виде:

$$\tilde{R}_0^* W_k = 0. \quad (7)$$

Аналогично получаем соотношения реортогонализации для (7):

$$W_k^r = W_k + A P_k \beta_k^r$$

Поправка β_k определяется уравнением:

$$(\tilde{R}_0^* A P_k) \beta_k^r = -\tilde{R}_0^* W_k$$

Следующим шагом получим формулу для вычисления P_{k+1} с учетом введенных обозначений

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{k+1}\mathbf{P}_{k+1} &= \mathbf{Q}_{k+1}(\mathbf{R}_{k+1} + \mathbf{P}_k\beta_k) = \\ &= \mathbf{Q}_k\mathbf{R}_{k+1} - \omega_k t \mathbf{Q}_k\mathbf{R}_{k+1} + (1 - \omega_k t) \mathbf{Q}_k\mathbf{P}_k\beta_k = \\ &= \mathbf{Q}_k\mathbf{R}_{k+1} - \omega_k t \mathbf{Q}_k\mathbf{P}_{k+1} + \mathbf{Q}_k\mathbf{P}_k\beta_k \end{aligned}$$

В матричном виде это выражение записывается как:

$$P_{k+1} = S_{k+1} + P_k\beta_k - \omega_k W_k$$

Для дополнительной минимизации нормы невязки поддерживается следующее соотношение:

$$\langle AS_k, R_{k+1} \rangle_F = 0$$

Для этого выражения также можно выписать процедуру реортогонализации:

$$R_{k+1}^r = R_{k+1} - \omega_k^r T_k$$

$$\omega_k^r = \frac{\langle R_{k+1}, T_k \rangle_F}{\langle T_{k+1}, T_k \rangle_F}$$

3.2 Ортогонализация векторов направлений и проверочных невязок

Вспомним вид алгоритма [3], в блоке Алгоритм 1 красным отмечены все места где используется блок векторов направлений P_k . Легко видеть, что он везде входит в алгоритм вместе матрицей коэффициентов (α_k и β_k). Так что если сделать замену $P_k \leftarrow P_k U$, где U - $s \times s$ матрица, то изменятся лишь сами матрицы коэффициентов, в то время как сами выражения в алгоритме останутся неизменными. Так что можно попробовать

Algorithm 1 Блочные стабилизированные бисопряженные градиенты

```

 $X_0$  - начальное приближение
 $R_0 = B - AX_0$ 
 $P_0 = R_0$ 
 $\tilde{R}_0$  - произвольная  $N \times s$  матрица
for  $k = 0, 1, 2, \dots$  do
    решить  $\tilde{R}_0^T A P_k \alpha_k = \tilde{R}_0^T R_k$ 
     $S_k = R_k - A P_k \alpha_k$ 
     $T_k = AS_k$ 
     $\omega_k = \frac{\langle T_k, S_k \rangle_F}{\langle T_k, T_k \rangle_F}$ 
     $X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k + \omega_k S_k$ 
     $R_{k+1} = S_k - \omega_k T_k$ 
    решить  $\tilde{R}_0^T A P_k \beta_k = -\tilde{R}_0^T T_k$ 
     $P_{k+1} = R_{k+1} + P_k \beta_k - \omega_k A P_k \beta_k$ 
end for
    
```

подобрать такую U , чтобы вычисления стали более устойчивыми. Например, можно сделать QR -разложение матрицы P_k :

$$P_k = Q_P R_P,$$

и в качестве U взять R_k^{-1} . Такой выбор U повлечет ортогонализацию P_k , что должно улучшить стабильность операций проектирования на вектора направлений.

Как указано в алгоритме 1, \tilde{R}_0 - произвольная матрица, обычно ее выбирают равной R_0 . Аналогично для улучшения стабильности предлагается сделать QR -разложение матрицы R_0 :

$$R_0 = Q_R R_R,$$

и сделать замену $\tilde{R}_0 \rightarrow Q_R$.

3.3 Выбор правых частей

Алгоритм перестает сходиться, если блок невязок становится почти вырожденным, поэтому предлагается на этапе инициализации алгоритма сделать $RRQR$ -разложение блока правых частей, рассмотреть получившуюся перестановку, и выбрать несколько правых частей с номерами, соответствующим первым номерам в перестановке. Благодаря такому выбору рассматривается более линейно-независимый набор столбцов, что положительно сказывается на сходимости.

3.4 Алгоритм

Algorithm 2 Регуляризованный блочный метод стабилизированных бисопряженных градиентов

```

 $X_0$  - начальное приближение;
 $R_0 = B - AX_0$ ;
 $P_0 = R_0$ ;
 $R_0 = \tilde{Q}\tilde{U}$  -  $QR$ -разложение  $R_0$ ;
 $\tilde{R}_0 = \tilde{U}$ ;
for  $k = 0, 1, \dots$  do
     $P_k = QU$  -  $QR$ -разложение  $P_k$ ;
     $P_k \rightarrow P_k U^{-1}$ ;
     $V_k = AP_k$ ;
    решить  $(\tilde{R}_0^* V_k) \hat{\alpha}_k = \tilde{R}_0^* R_k$ ;
     $\hat{S}_k = R_k - V_k \hat{\alpha}_k$ ;
    решить  $(\tilde{R}_0^* V_k) \alpha_k = \tilde{R}_0^* \hat{S}_k$ ;
     $S_k = \hat{S}_k - V_k \alpha_k$ ;
     $T_k = AS_k$ ;
     $\hat{\omega}_k = \langle S_k, T_k \rangle_F / \langle T_k, T_k \rangle_F$ ;
     $\hat{R}_{k+1} = S_k - \hat{\omega}_k T_k$ ;
     $\omega_k = \langle \hat{R}_{k+1}, T_k \rangle_F / \langle T_k, T_k \rangle_F$ ;
     $R_{k+1} = \hat{R}_{k+1} - \omega_k T_k$ ;
     $X_{k+1} = X_k + P_k(\hat{\alpha}_k + \alpha_k) + (\hat{\omega}_k + \omega_k) S_k$ ;
    решить  $(\tilde{R}_0^* V_k) \hat{\beta}_k = -\tilde{R}_0^* T_k$ ;
     $\hat{W}_k = T_k + V_k \hat{\beta}_k$ ;
    решить  $(\tilde{R}_0^* V_k) \beta_k = -\tilde{R}_0^* \hat{W}_k$ ;
     $W_k = \hat{W}_k + V_k \beta_k$ ;
     $P_{k+1} = S_k + P_k(\hat{\beta}_k + \beta_k) - (\hat{\omega}_k + \omega_k) W_k$ ;
end for
    
```

3.5 Проблемы

В данном алгоритме возможны аварийные остановки, в случаях, когда матрица $\tilde{R}_0^* AP_k$ становится вырожденной. В такой ситуации авторы [3] предлагают провести рестарт с другой \tilde{R}_0 .

Но главным недостатком алгоритма [3] является выбор ω в виде скалярной матрицы, из-за этого чем больше размер блока мы берем для расчета, тем меньше по модулю становится ω , что в свою очередь ведет к стагнации алгоритма. Наша модификация алгоритма также страдает от этой проблемы. Была надежда, что получится обобщить метод на случай, когда ω_k - произвольная $s \times s$ матрица, но в ходе исследования выяснилось, что это невозможно из-за некоммутативности матричнозначных полиномов, которая не позволяет получить короткие итерационные формулы.

4 Численные эксперименты

Тесты производились на интересующей нас задаче – линейной системе с многими правыми частями, возникающей при решении задачи электромагнитного рассеяния методом интегральных уравнений [STAVTSEV]. Порядок системы - 14144, всего правых частей - 722. Каждая правая часть соответствует разным углам падения, а также первая половина правых частей отличается от правой типом поляризации.

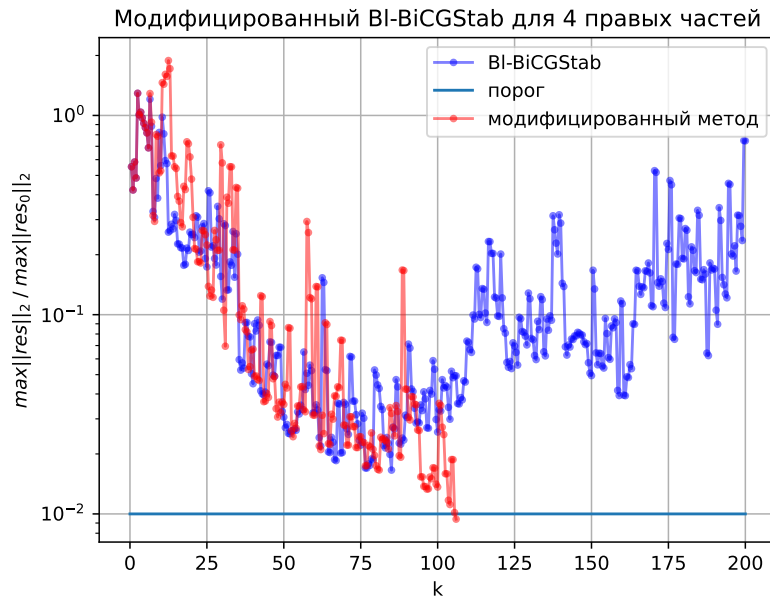
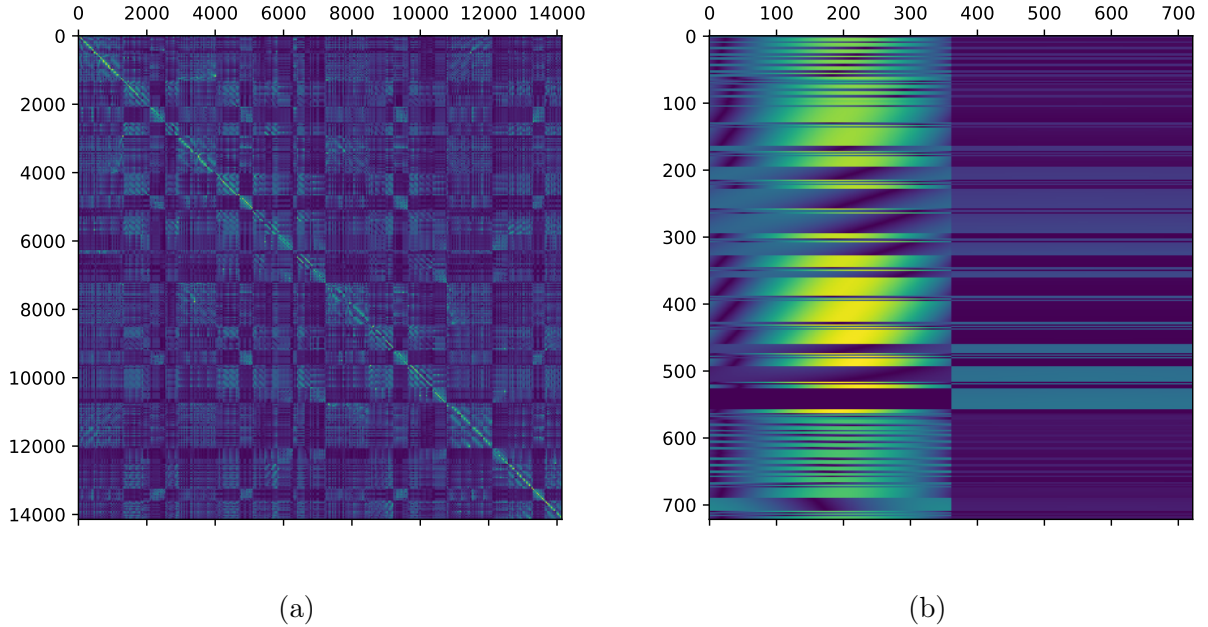


Рис. 2

Первый тест демонстрирует, что метод из статьи [GUENNOUNI] не сходится с требуемой точностью, в то время как версия с улучшениями, описанными в главе 3, сходится линейно без проблем. Эксперимент проводился в одинарной точности для четырех правых частей с номерами: 0, 90, 180, 270. Его результаты представлены на рис.2

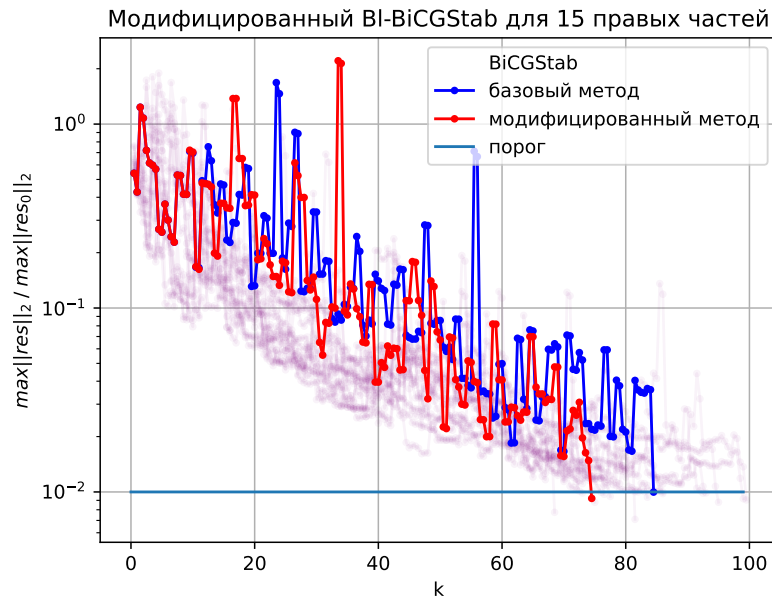


Рис. 3

15 правых частей, уменьшения числа итераций, считаем в двойной точности

Второй тест демонстрирует, что улучшения, описанные в главе 3 позволяют получить выгоду по количеству матвеков, по сравнению с решением систем с каждой правой частью в отдельности. Эксперимент проводился в двойной точности с 15 правыми частями, выбранными с помощью RRQR. Его результаты представлены на рис.3. По оси абсцисс - количество итераций, по оси ординат - относительная максимальная невязка в блоке. Фиолетовым изображено падение невязки при решении задачи с каждой правой частью в отдельности, синим - метод из статьи [GUENNOUNI], красным - метод с улучшениями из главы 3. Для решения этой задачи стабилизированными бисопряженными градиентами было потрачено 2525 матвеков, для решения методом из статьи [GUENNOUNI] - 2535, модифицированный метод сошелся за 2235 матвеков, таким образом выгода составляет 12% по сравнению с неблочной версией.

более 30 правых частей, демонстрация отсутствия взрыва невязки

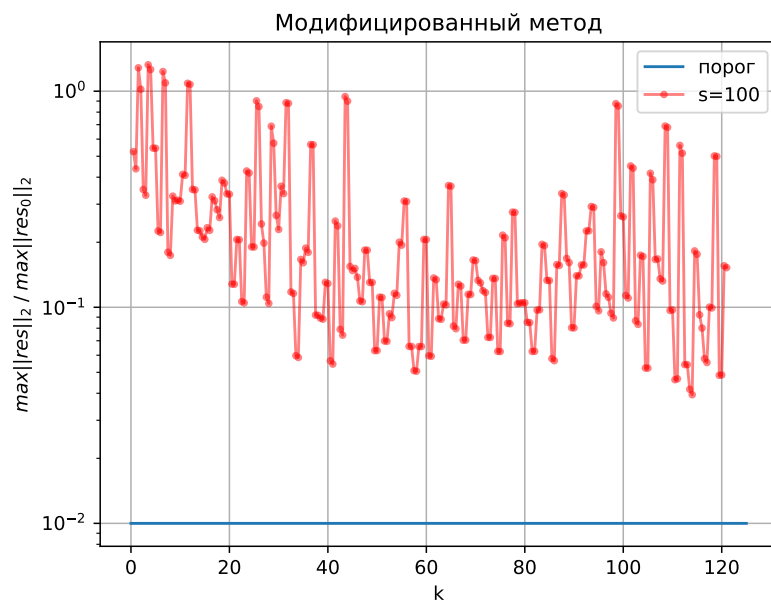


Рис. 4

5 Заключение

Результаты

Нерешенные проблемы редукции блока

Список литературы

- [1] *van der Vorst, H. A.* Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems / H. A. van der Vorst // *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. — 1992. — Vol. 13, no. 2. — Pp. 631–644. <https://doi.org/10.1137/0913035>.
- [2] *O’Leary, Dianne P.* The block conjugate gradient algorithm and related methods / Dianne P. O’Leary // *Linear Algebra and its Applications*. — 1980. — Vol. 29. — Pp. 293–322. — Special Volume Dedicated to Alson S. Householder. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0024379580902475>.
- [3] *el Guennouni A., Jbilou K. Sadok H.* A block version of BiCGSTAB for linear systems with multiple right-hand sides. / Jbilou K. Sadok H. el Guennouni, A. // *ETNA. Electronic Transactions on Numerical Analysis [electronic only]*. — 2003. — Vol. 16. — Pp. 129–142. <http://eudml.org/doc/124803>.