

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	Метод стабилизированных бисопряженных градиентов	5
2.4	Метод блочных сопряженных градиентов	5
2.5	Метод блочных бисопряженных градиентов	5
2.6	Метод блочных стабилизированных 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	Проблемы	8
4	Численные эксперименты	9
5	Заключение	11

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 Метод стабилизированных бисопряженных градиентов

[VAN DER VORST BI-CGSTAB: A FAST AND SMOOTHLY CONVEGRING VARIANT OF BI-CG FOR THE SOLUTION OF NONSYMMETRIC LINEAR SYSTEMS]

2.4 Метод блочных сопряженных градиентов

[DIANNE P. O'LEARY THE BLOCK CONJUGATE GRADIENT ALGORYTHM AND RELATED METHODS]

2.5 Метод блочных бисопряженных градиентов

[DIANNE P. O'LEARY THE BLOCK CONJUGATE GRADIENT ALGORYTHM AND RELATED METHODS]

2.6 Метод блочных стабилизированных бисопряженных градиентов

[GUENNOUNI A BLOCK VERSION OF BCGSTAB FOR LINEAR SYSTEMS WITH MULTIPLE RIGHT-HAND SIDES]

2.6.1 Матричнозначные полиномы

Проблемы со сходимостью метода из [GUENNOUNI], 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

$$P_k = Q_P R_P$$

$$\tilde{R}_0$$

Вспомним вид алгоритма [GUENNOUNI], 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 $(\alpha_k$ и $\beta_k)$. 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 по-

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  $\tilde{R}_0^T A P_k \alpha_k = \tilde{R}_0^T R_k$ 
     $S_k = R_k - A P_k \alpha_k$ 
     $T_k = A S_k$ 
     $\omega_k = \frac{\langle T_k, S_k \rangle_F}{\langle T_k, T_k \rangle_F}$ 
     $X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k + \omega_k S_k$ 
     $R_{k+1} = S_k - \omega_k T_k$ 
    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
    
```

пробовать 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 выбираюь 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 Проблемы

Основным недостатком блочного метода бисопряжённых градиентов [GUENNOUNI] является то, что ω_k является скаляром. Была большая надежда на то, 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.

возможные брейкдауны [GUENNOUNI]

В данном алгоритме возможны брейкдауны, в случаях, когда матрица $\tilde{R}_0 A P_k$ становится вырожденной. В такой ситуации авторы [GUENNOUNI] предлагают провести рестарт с другой \tilde{R}_0 . Также возможны стагнации, если $\omega_k \approx 0$. **А что делать то в этом случае?**

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.

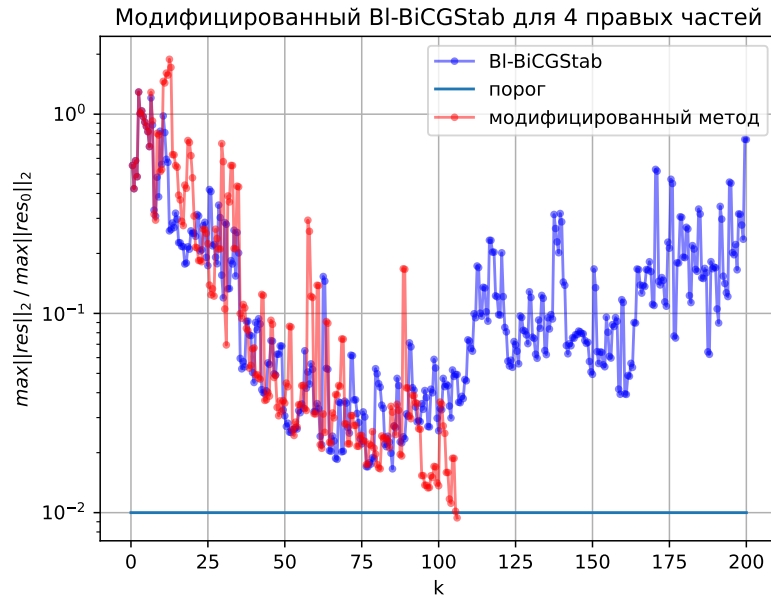


Рис. 1

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.1

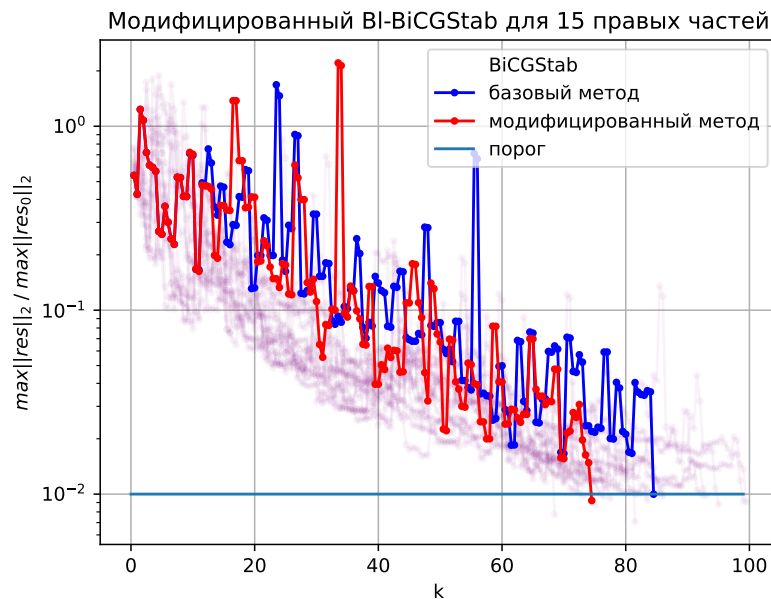


Рис. 2

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.2. 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 бисопряжёнными 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

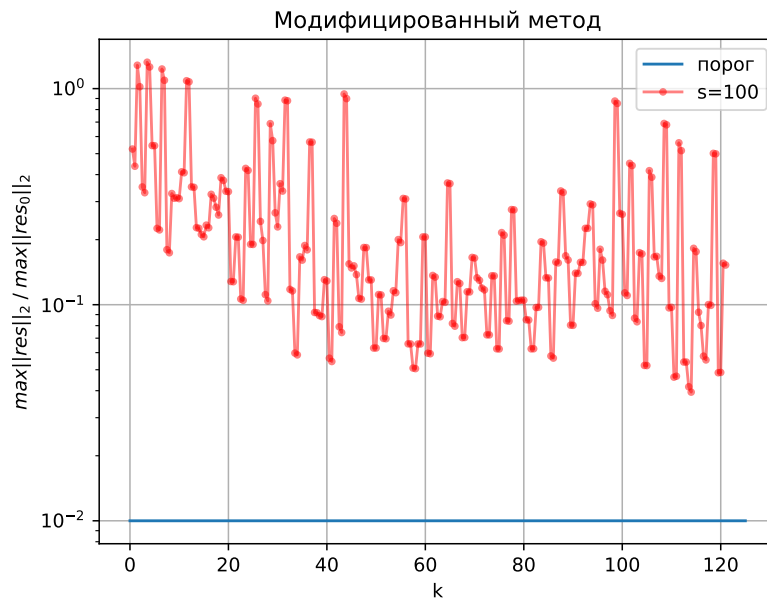


Рис. 3

5 Заключение

Результаты

Нерешенные проблемы редукции блока

Список литературы

- [1] *Mott-Smith, H.* The theory of collectors in gaseous discharges / *H. Mott-Smith, I. Langmuir* // *Phys. Rev.* — 1926. — Vol. 28.
- [2] *Морз, Р.* Бесстолкновительный PIC-метод / *Р. Морз* // Вычислительные методы в физике плазмы / Ed. by Б. Олдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. — М.: Мир, 1974.
- [3] *Киселёв, А. А.* Численное моделирование захвата ионов бесстолкновительной плазмы электрическим полем поглощающей сферы / *А. А. Киселёв, Долгонос М. С., Красовский В. Л.* // Девятая ежегодная конференция «Физика плазмы в Солнечной системе». — 2014.