

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	Процедура Арнольди	5
2.2	Симметричный алгоритм Ланцоша	5
2.3	Метод сопряженных градиентов	6
2.4	Процесс биортогонализации Ланцоша	8
2.5	Метод бисопряженных градиентов	9
2.6	Стабилизированный метод бисопряженных градиентов	9
2.7	Блочный метод сопряженных градиентов	9
2.8	Блочный метод бисопряженных градиентов	9
2.9	Блочный стабилизированный метод бисопряженных градиентов	9
2.9.1	Матричнозначные полиномы	9
2.9.2	Алгоритм	9
2.10	Блочный симметричный метод квазимиимальных невязок	9
3	Улучшения блочного метода стабилизированных бисопряженных градиентов	10
3.1	Реортогонализация для поддержания биортогональных соотношений	10
3.2	Ортогонализация векторов направлений и проверочных невязок	11
3.3	Выбор правых частей	12
3.4	Алгоритм	12
3.5	Проблемы	12
4	Модификация блочного симметричного метода квазимиимальных невязок	14
5	Численные эксперименты	17
6	Заключение	21

1 Введение

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

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

$$AX = B,$$

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 сложности. 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;

2 Крыловские методы решения систем уравнений

Ключевым объектом в рассматриваемом классе методов является пространство Крылова, определим его.

Определение 1. Пусть A - матрица порядка N , v - вектор размерности N . Тогда линейная оболочка вида $K_m(A, v) \equiv \{v, Av, A^2v, \dots, A^{m-1}v\}$ называется подпространством Крылова, где m - натуральное число.

Все рассматриваемые в дальнейшем методы являются проекционными. В таких методах приближенное решение ищется в крыловском пространстве при этом решение на подпространстве ищется, как правило, на основе некоторого проекционного соотношения (которое и задаёт метод).

2.1 Процедура Арнольди

Процедура Арнольди - это алгоритм построения ортогонального базиса в крыловском подпространстве K_m . Алгоритм 1 представляет наиболее простую вариацию такого алгоритма в точной арифметике.

Алгоритм 1 Алгоритм Арнольди

```

1: Выберем  $v_1 = v / \|v\|_2$ , так что  $\|v_1\|_2 = 1$ 

2: for  $j = 1, 2, \dots, m$  do
3:   for  $i = 1, 2, \dots, j$  do
4:      $h_{ij} \leftarrow (Av_j, v_i)$ 
5:   end for
6:    $w_j \leftarrow Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$ 
7:    $h_{j+1,j} \leftarrow \|w_j\|_2$ 
8:   if  $h_{j+1,j} = 0$  then
9:     Stop
10:  end if
11:   $v_{j+1} \leftarrow w_j / h_{j+1,j}$ 
12: end for

```

Алгоритм на каждом шаге ортогонализует Av_j ко всем предыдущим v_i , применяя процедуру Грама-Шмидта.

Результат работы алгоритма можно записать в матричном виде: обозначим V_m - $N \times m$ матрицу со столбцами v_1, \dots, v_m ; \bar{H}_m - $(m+1) \times (m)$ хессенбергова матрица с элементами h_{ij} из алгоритма 1; H_m - $m \times m$ матрица, получающаяся из \bar{H}_m путем удаления последней строки. Тогда, процедура Арнольди влечет следующие соотношения:

$$AV_m = V_m H_m + w_m e_m^T \quad (1)$$

$$= V_{m+1} \bar{H}_m, \quad (2)$$

$$V_m^T AV_m = H_m \quad (3)$$

2.2 Симметричный алгоритм Ланцоша

Симметричный алгоритм Ланцоша - это частный случай процедуры Арнольди, когда матрица A - симметричная, при таком условии хессенбергова матрица H_m становится симметричной тридиагональной T_m . Это позволяет получить короткие рекуррентные соотношения, приведённые в Алгоритме 2

Алгоритм 2 Симметричный алгоритм Ланцоша

```

1: Выберем  $v_1 = v/\|v\|_2$ , так что  $\|v_1\|_2 = 1$ 
2:  $\beta_1 \leftarrow 0, v_0 \leftarrow 0$ 
3: for  $j = 1, 2, \dots, m$  do
4:    $w_j \leftarrow Av_j - \beta_j v_{j-1}$ 
5:    $\alpha_j \leftarrow (w_j, v_j)$ 
6:    $w_j \leftarrow w_j - \alpha_j v_j$ 
7:    $\beta_{j+1} \leftarrow \|w_j\|_2$ 
8:   if  $\beta_{j+1} = 0$  then
9:     Stop
10:  end if
11:   $v_{j+1} \leftarrow w_j/\beta_{j+1}$ 
12: end for

```

При этом матрица T_m имеет вид:

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \beta_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix} \quad (4)$$

2.3 Метод сопряженных градиентов

Симметричный алгоритм Ланцоша можно использовать для итеративного решения систем линейных уравнений с симметричной положительно определенной матрицей.

Пусть задано начальное приближение x_0 , и векторы направлений из алгоритма Ланцоша v_i , $i = 1, \dots, m$. На m -ом шаге алгоритма приближенное решение ищется в аффинном пространстве $x_0 + K_m$, где $K_m(A, r_0) \equiv \{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \dots, A^{m-1} r_0\}$, $r_0 = b - Ax_0$. На невязки при этом налагается условие

$$b - Ax_m \perp K_m. \quad (5)$$

Если взять $v_1 = r_0/\|r_0\|_2$ и обозначить $\beta = \|r_0\|_2$. Тогда $V_m^T A V_m = T_m$ из (3), а также $V_m^T r_0 = V_m^T (\beta v_1) = \beta e_1$. Разложим приближенное решение на m -ом шаге по базису из векторов v_i , $i = 1, \dots, m$:

$$x_m = x_0 + V_m y_m. \quad (6)$$

Это выражение эквивалентно равенству:

$$r_m = r_0 - A V_m y_m, \quad (7)$$

домножим слева на V_m^T :

$$V_m^T r_m = V_m^T r_0 - V_m^T A V_m y_m. \quad (8)$$

Из (5) следует, что $V_m^T r_m = 0$, учтём это в (8) и выразим y_m :

$$y_m = T_m^{-1} \beta e_1. \quad (9)$$

Получим выражение для r_m :

$$\begin{aligned}
 r_m &= b - A(x_0 + V_m y_m) \\
 &= r_0 - AV_m y_m \\
 &= \beta v_1 - (V_m T_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T) y_m \\
 &= V_m \underbrace{(\beta e_1 - H_m y_m)}_{=0} - h_{m+1,m} e_m^T y_m v_{m+1} \\
 r_m &= -h_{m+1,m} e_m^T y_m v_{m+1}.
 \end{aligned} \tag{10}$$

Из этого выражения следует, что $r_m \parallel v_{m+1}$, а значит, что невязки на каждом шаге ортогональны друг другу.

Получим короткие итерационные соотношения для обновления приближенного решения x_m . LU-разложение матрицы T_m :

$$T_m = L_m U_m = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \lambda_2 & 1 & & & \\ & \lambda_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & \lambda_m & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 & \beta_2 & & & \\ & \eta_2 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \eta_{m-1} & \beta_m \\ & & & & \eta_m \end{pmatrix}$$

Введем обозначения

$$P_m \equiv V_m U_m^{-1}, \tag{11}$$

$$z_m \equiv L_m^{-1} \beta e_1, \tag{12}$$

тогда приближенное решение выражается как

$$x_m = x_0 + P_m z_m. \tag{13}$$

Используя равенство (11) получим формулу для обновления p_m -последнего столбца p_m матрицы P_m

$$P_m U_m = V_m \tag{14}$$

$$p_m \eta_m + \beta_m p_{m-1} = v_m \tag{15}$$

$$p_m = \eta_m^{-1} (v_m - \beta_m p_{m-1}) \tag{16}$$

Выразим элементы из последней строчки матрицы T_m с помощью LU-разложения:

$$\alpha_m = \lambda_m \beta_m + \eta_m \implies \eta_m = \alpha_m - \lambda_m \beta_m$$

$$\beta_m = \lambda_m \eta_{m-1} \implies \lambda_m = \beta_m / \eta_{m-1}$$

В силу вида матрицы L_m :

$$\begin{aligned}
 z_m &= \begin{pmatrix} z_{m-1} \\ \zeta_m \end{pmatrix}, \\
 \zeta_m &= -\lambda_m \zeta_{m-1}.
 \end{aligned}$$

Как результат получаем формулу для обновления x_m :

$$x_m = x_{m-1} + \zeta_m p_m$$

Покажем, что столбцы P_m образуют А-ортогональную систему, т.е, что $(Ap_i, p_j) = 0$, для $i \neq j$. Для этого нужно показать, что $P_m^T A P_m$ - диагональная матрица. Подставим определение P_m в это выражение:

$$P_m^T A P_m = U_m^{-T} V_m^T A V_m U_m^{-1} \quad (17)$$

$$= U_m^{-T} T_m U_m^{-1} \quad (18)$$

$$= U_m^{-T} L_m \quad (19)$$

$U_m^{-T} L_m$ - нижнетреугольная матрица, но она также является и симметричной, так как $P_m^T A P_m$ - симметричная матрица. Таким образом, $U_m^{-T} L_m$ - диагональная матрица.

Следствием этого является то, что обновлять приближенное решение можно исходя из поддержания свойств ортогональности невязок и А-ортогональности векторов направлений p_i . В последующий выкладках вектора p_j будут нумероваться с нуля, а не с единицы, как это было раньше. А также коэффициенты будут переименованы, чтобы соответствовать общепринятым обозначениям.

$$\begin{aligned} x_{j+1} &= x_j + \alpha_j p_j \implies r_{j+1} = r_j - \alpha_j A p_j \\ \alpha_j &= (r_j, r_j) / (A p_j, r_j) \end{aligned}$$

Из уравнения (16) следует, что

$$\begin{aligned} p_{j+1} &= r_{j+1} + \beta_j p_j \\ \beta_j &= -(r_{j+1}, A p_j) / (p_j, A p_j) = \frac{1}{\alpha_j} (r_{j+1}, (r_{j+1} - r_j)) / (A p_j, p_j) = (r_{j+1}, r_{j+1}) / (r_j, r_j) \end{aligned}$$

Это выражение и А-ортогональность p_j в свою очередь можно использовать, чтобы преобразовать выражение для α_j :

$$\begin{aligned} (A p_j, r_j) &= (A p_j, p_j - \beta_{j-1} p_{j-1}) = (A p_j, p_j) \\ \alpha_j &= (r_j, r_j) / (A p_j, p_j) \end{aligned}$$

Теперь у нас есть всё, чтобы записать алгоритм.

Алгоритм 3 Метод сопряженных градиентов

```

1:  $r_0 \leftarrow b - A x_0$ ,  $p_0 \leftarrow r_0$ .
2: for  $j = 0, 1, \dots$  do
3:    $\alpha_j \leftarrow (r_j, r_j) / (A p_j, p_j)$ 
4:    $x_{j+1} \leftarrow x_j + \alpha_j p_j$ 
5:    $r_{j+1} \leftarrow r_j - \alpha_j A p_j$ 
6:    $\beta_j \leftarrow (r_{j+1}, r_{j+1}) / (r_j, r_j)$ 
7:    $p_{j+1} \leftarrow r_{j+1} + \beta_j p_j$ 
8: end for
```

Этот метод можно адаптировать и для систем общего вида, если домножить обе части уравнения $Ax = b$ на A^T , и решать систему с симметричной положительно определенной матрицей $A^T A$, однако число обусловленности при этом возрастает в квадрат раз из-за чего данный вариант может давать плохие результаты. [1]

2.4 Процесс биортогонализации Ланцоша

Для несимметричных систем можно предъявить алгоритм похожий на симметричный алгоритм Ланцоша, но который будет строить не ортогональный базис в пространстве Крылова, а пару биортогональных базисов в пространствах $K_m(A, v_1) = \text{span}\{v_1, A v_1, \dots, A^{m-1} v_1\}$ и $K_m(A^T, v_1) = \text{span}\{v_1, A^T v_1, \dots, (A^T)^{m-1} v_1\}$.

Алгоритм 4 Процесс биортогонализации Ланцоша

```

1: Выберем  $v_1, w_1$  такие что  $(v_1, w_1) = 1$ .
2:  $\beta_1 = \delta_1 \equiv 0, w_0 = v_0 \equiv 0$ 
3: for  $j = 1, 2, \dots, m$  do
4:    $\alpha_j = (Av_j, w_j)$ 
5:    $\hat{v}_{j+1} = Av_j - \alpha_j v_j - \beta_j v_{j-1}$ 
6:    $\hat{w}_{j+1} = A^T w_j - \alpha_j w_j - \delta_j w_{j-1}$ 
7:    $\delta_{j+1} = |(\hat{v}_{j+1}, \hat{w}_{j+1})|^{1/2}$ 
8:   if  $\delta_{j+1} = 0$  then
9:     Stop
10:  end if
11:   $\beta_{j+1} = (\hat{v}_{j+1}, \hat{w}_{j+1})/\delta_{j+1}$ 
12:   $v_{j+1} = \hat{v}_{j+1}/\beta_{j+1}$ 
13:   $w_{j+1} = \hat{w}_{j+1}/\delta_{j+1}$ 
14: end for

```

Введём обозначение

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \delta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \delta_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & \delta_m & \alpha_m \end{pmatrix} \quad (20)$$

2.5 Метод бисопряженных градиентов

[1]

2.6 Стабилизированный метод бисопряженных градиентов

[2]

2.7 Блочный метод сопряженных градиентов

[3]

2.8 Блочный метод бисопряженных градиентов

[3]

2.9 Блочный стабилизированный метод бисопряженных градиентов

[4]

2.9.1 Матричнозначные полиномы

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

2.9.2 Алгоритм

2.10 Блочный симметричный метод квазимиимальных невязок

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:

$$C(\mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1}) = 0, \quad (21)$$

$$C^{(1)}(\mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k) = 0. \quad (22)$$

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 (21) можно представить в виде:

$$\tilde{R}_0^* S_k = 0. \quad (23)$$

В точной арифметике это соотношение выполняется строго, однако при вычислениях на компьютере соотношение (23) 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:

$$S_k^r = S_k - A P_k \alpha_k^r. \quad (24)$$

При этом мы стремимся поддерживать соотношение $\tilde{R}_0^* S_k^r = 0$ с уточненным блоком S_k^r . Тогда, домножая обе части выражения (24) слева на \tilde{R}_0 , получим уравнение для поправки α_k^r :

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

Аналогичным образом рассмотрим (22). Используя полиномиальное соотношение для \mathbf{P}_{k+1} , получаем следующее выражение:

$$t \mathbf{Q}_k \mathbf{P}_{k+1} = t \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1} + t \mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k. \quad (25)$$

Введем обозначение $W_k \equiv (t \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1})(A) \circ R_0$. Тогда выражение (25) можно записать в матричном виде:

$$W_k = A S_k + A P_k \beta_k. \quad (26)$$

Тогда выражение (22) можно представить в виде:

$$\tilde{R}_0^* W_k = 0. \quad (27)$$

Аналогично получаем соотношения реортогонализации для (27):

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

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:

$$\begin{aligned} R_{k+1}^r &= R_{k+1} - \omega_k^r T_k \\ \omega_k^r &= \frac{\langle R_{k+1}, T_k \rangle_F}{\langle T_{k+1}, T_k \rangle_F} \end{aligned}$$

3.2 Ортогонализация векторов направлений и проверочных невязок

В Алгоритме 5 приведён метод, предложенный в статье [4]. 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

Алгоритм 5 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
    
```

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

$$P_k = Q_{P_k} R_{P_k},$$

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

Как указано в алгоритме 5, \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

Алгоритм 6 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 [4] предлагают провести рестарт с другой \tilde{R}_0 .

Но главным недостатком алгоритма [4] 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 Модификация блочного симметричного метода квазимиимальных невязок

Один из ключевых элементов блочного симметричного метода квазимиимальных невязок [5] является процесс Грамма-Шмидта с квазискалярным произведением. Далее будет представлена модификация этого алгоритма, использующая настоящее QR-разложение. Благодаря этому невязка на шаге алгоритма окажется ближе к настоящей невязке. Немаловажно и то, что квази-QR в некотором роде эквивалентно LL^T разложению матрицы $V^T V$, причём это разложение выполняется без выбора ведущего элемента. В отличие от разложения Холецкого, для которого из-за положительной определенности матрицы следует, что все ведущие миноры положительно определены и обусловлены не хуже, чем вся матрица, и поэтому для него выбор ведущего элемента не так существен, здесь это является проблемой, поэтому важно модифицировать алгоритм, не использующим квази-QR-разложение. В дополнение ко всему вышесказанному, при этом становится возможным использование устойчивых реализаций QR-разложения и применение их библиотечных реализаций.

Блочный симметричный процесс Ланцоша приводит к следующему матричному соотношению:

$$A [V_1 \dots V_k \ V_{k+1}] = [V_1 \dots V_k \ V_{k+1}] \begin{bmatrix} \alpha_1 & \delta_1 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \delta_2 & & \\ & \beta_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \alpha_{k-1} & \delta_{k-1} \\ & & & \beta_k & \alpha_k \\ & & & & \beta_{k+1} \end{bmatrix}, \quad (28)$$

где $\delta_{i-1} = \beta_i^T$ в версии из статьи [5], в нашей модификации же получится другой вид для этой матрицы коэффициентов. Из (28) для k -го блока следует:

$$AV_k = V_{k-1}\delta_{k-1} + V_k\alpha_k + V_{k+1}\beta_{k+1} \quad (29)$$

При построении базиса в блочном крыловском пространстве, требуется выполнение следующего свойства:

$$V_i^T V_j = 0, \quad i \neq j \quad (30)$$

Домножая слева выражение (29) на V_{k-1}^T и используя соотношение (30) получаем системы линейных уравнений на матрицу δ_{k-1} :

$$V_{k-1}^T V_{k-1} \delta_{k-1} = V_{k-1}^T AV_k. \quad (31)$$

Сделав замену в (29) вида $k \rightarrow k-1$ и учтя выражение (31) выразим δ_{k-1} через β_k :

$$V_{k-1}^T V_{k-1} \delta_{k-1} = \beta_k^T V_k^T V_k.$$

Введем обозначение $\gamma_k = V_k^T V_k$.

Тогда окончательный вид для δ_{k-1} :

$$\delta_{k-1} = \gamma_{k-1}^{-1} \beta_k^T \gamma_k. \quad (32)$$

Аналогично δ_{k-1} из (29) получим системы линейных уравнений на α_k :

$$\gamma_k \alpha_k = V_k^T AV_k.$$

И воспользовавшись свойством (30) преобразуем выражение для α_k :

$$\alpha_k = \gamma_k^{-1} V_k^T (AV_k - V_{k-1} \delta_{k-1}). \quad (33)$$

Выбор β_{k+1} является произвольным и определяется целями исследователя, в предлагаемой модификации β_{k+1} выбрано таким, чтобы выполнялось соотношение $V_{k+1}^* V_{k+1} = I$, где I - единичная $s \times s$ матрица. Этого можно достичь с помощью QR-разложения:

$$V_{k+1}, \beta_{k+1} \xleftarrow{QR} AV_k - V_{k-1} \delta_{k-1} - V_k \alpha_k. \quad (34)$$

Этот выбор обладает рядом преимуществ:

1. получение QR-разложения в сравнении с квази-QR-разложением является более устойчивой операцией,
2. на первой итерации алгоритм ведёт себя как обобщённый метод минимальных невязок, что обеспечивает на первой итерации достижение точного минимума невязки в построенном к этому моменту пространстве Крылова, что в свою очередь предотвращает большие скачки невязки на первых итерациях, как это наблюдается в алгоритме из статьи [5].

Однако с этими изменениями метод все еще не сходится в задаче электромагнитного рассеяния [6] в одинарной точности, поэтому необходимо получить более устойчивые формулы для рекуррентных соотношений.

Для этого можно производить квази-реортогонализацию для поддержания соотношения (30). Поправка к V_{k+1} :

$$V_{k+1} = V_{k-1} \tilde{\delta}_{k-1} + V_k \tilde{\alpha}_k + \tilde{V}_{k+1} \tilde{\beta}_{k+1}, \quad (35)$$

где \tilde{V}_{k+1} - более точно вычисленный блок V_{k+1} . Используя (30), получим формулы для поправок:

$$\tilde{\delta}_{k-1} = \gamma_{k-1}^{-1} V_{k-1}^T V_{k+1} \quad (36)$$

$$\tilde{\alpha}_k = \gamma_k^{-1} V_k^T V_{k+1} \quad (37)$$

$$\tilde{V}_{k+1} \tilde{\beta}_{k+1} \xleftarrow{QR} V_{k+1} - V_{k-1} \tilde{\delta}_{k-1} - V_k \tilde{\alpha}_k \quad (38)$$

Подставим (35) в (29):

$$AV_k = V_{k-1}(\delta_{k-1} + \tilde{\delta}_{k-1} \beta_{k+1}) + V_k(\alpha_k + \tilde{\alpha}_k \beta_{k+1}) + \tilde{V}_{k+1} \beta_{k+1} \tilde{\beta}_{k+1} \quad (39)$$

Таким образом, матрицы коэффициентов после реортогонализации имеют вид:

$$\delta_{k-1}^r = \delta_{k-1} + \tilde{\delta}_{k-1} \beta_{k+1} \quad (40)$$

$$\alpha_k^r = \alpha_k + \tilde{\alpha}_k \beta_{k+1} \quad (41)$$

$$\beta_{k+1}^r = \beta_{k+1} \tilde{\beta}_{k+1} \quad (42)$$

Также предлагается перед рассмотренной квази-реортогонализацией провести реортогонализацию для QR-разложения (34) стандартным образом:

$$V_{k+1}, \beta_{k+1} \xleftarrow{QR} AV_k - V_{k-1} \delta_{k-1} - V_k \alpha_k \quad (43)$$

$$V_{k+1}^r, \tilde{\beta}_{k+1} \xleftarrow{QR} V_{k+1} \quad (44)$$

$$\beta_{k+1}^r = \tilde{\beta}_{k+1} \beta_{k+1}. \quad (45)$$

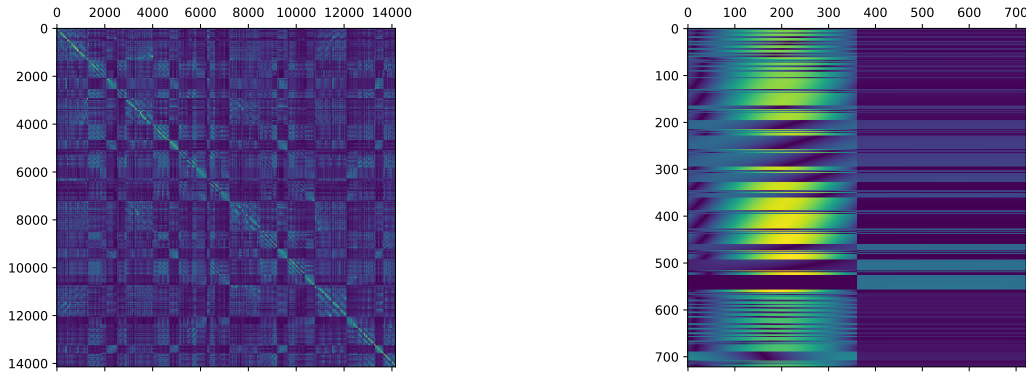
Окончательный вид алгоритма, красным отмечена процедура реортогонализации:

Алгоритм 7 Модифицированный блочный симметричный метод квазимиимальных невязок

$V_0 = P_0 = P_{-1} = 0_{N \times s}$, N - размер матрицы A , s - количество правых частей.
 $c_0 = b_{-1} = b_0 = 0_{s \times s}$
 $a_0 = d_{-1} = d_0 = I_{s \times s}$
 $R_0 = B - AX_0$
 $V_1, \beta_1 \xleftarrow{QR} R_0$
 $\gamma_0 = I_{s \times s}$
 $\gamma_1 = V_1^T V_1$
 $\tilde{\tau}_1 = \beta_1$
for $k = 1, \dots$ **do**
 $\delta_{k-1} = \gamma_{k-1}^{-1} \beta_k^T \gamma_k$
 $\tilde{V}_{k+1} = AV_k - V_{k-1} \delta_{k-1}$
 $\alpha_k = \gamma_k^{-1} V_k^T \tilde{V}_{k+1}$
 $\tilde{V}_{k+1} = \tilde{V}_{k+1} - V_k \alpha_k$
 $V_{k+1}, \beta_{k+1} \xleftarrow{QR} \tilde{V}_{k+1}$
 $V_{k+1}, \tilde{\beta}_{k+1} \xleftarrow{QR} V_{k+1}$
 $\beta_{k+1} \leftarrow \beta_{k+1} \beta_{k+1}$
 $\tilde{\alpha}_k = \gamma_k^{-1} V_k^T V_{k+1}$
 $\alpha_k \leftarrow \alpha_k + \tilde{\alpha}_k \beta_{k+1}$
 $V_{k+1} \leftarrow V_{k+1} - V_k \tilde{\alpha}_k$
 $\tilde{\delta}_{k-1} = \gamma_{k-1}^{-1} V_{k-1}^T V_{k+1}$
 $\delta_{k-1} \leftarrow \delta_{k-1} + \tilde{\delta}_{k-1} \beta_{k+1}$
 $V_{k+1} \leftarrow V_{k+1} - V_{k-1} \tilde{\delta}_{k-1}$
 $V_{k+1}, \tilde{\beta}_{k+1} \xleftarrow{QR} V_{k+1}$
 $\beta_{k+1} \leftarrow \tilde{\beta}_{k+1} \beta_{k+1}$
 $\gamma_{k+1} = V_{k+1}^T V_{k+1}$
 $\theta_k = b_{k-2} \delta_{k-1}$
 $\eta_k = a_{k-1} d_{k-2} \delta_{k-1} + b_{k-1} \alpha_k$
 $\zeta_k = c_{k-1} d_{k-2} \delta_{k-1} + d_{k-1} \alpha_k$
 $Q_k, \begin{bmatrix} \zeta_k \\ 0_{s \times s} \end{bmatrix} \xleftarrow{QR} \begin{bmatrix} \tilde{\zeta}_k \\ \omega_{k+1} \beta_{k+1} \end{bmatrix}$
 $\begin{bmatrix} a_k & b_k \\ c_k & d_k \end{bmatrix} \leftarrow Q_k^*$
 $V_k = (V_k - P_{k-1} \eta_k - P_{k-2} \theta_k) \zeta_k^{-1}$
 $\tau_k = a_k \tilde{\tau}_k$
 $X_k = X_{k-1} + P_k \tau_k$
 $\tilde{\tau}_{k+1} = c_k \tilde{\tau}_k$
end for

5 Численные эксперименты

Тесты производились на интересующей нас задаче – линейной системе с многими правыми частями, возникающей при решении задачи электромагнитного рассеяния методом интегральных уравнений [6]. Порядок системы - 14144, количество правых частей - 722. Каждая правая часть соответствует разным углам падения, а также первая половина правых частей отличается от второй типом поляризации. При этом матрица системы является комплексной и симметричной.



(a) Матрица системы в логарифмическом масштабе (отображены модули элементов матрицы).

(b) первые 722 строки блока правых частей в логарифмическом масштабе (отображены модули элементов матрицы).

Рис. 1

На рис.1 представлен вид матрицы системы и первые 722 строки блока правых частей. Из-за разных поляризаций первая половина правых частей сильно отличается от второй половины, и если применять блочные крыловские алгоритмы к блоку правых частей, содержащему правые части из первой и второй половины одновременно, то алгоритмы могут очень плохо себя показывать в таком сценарии.

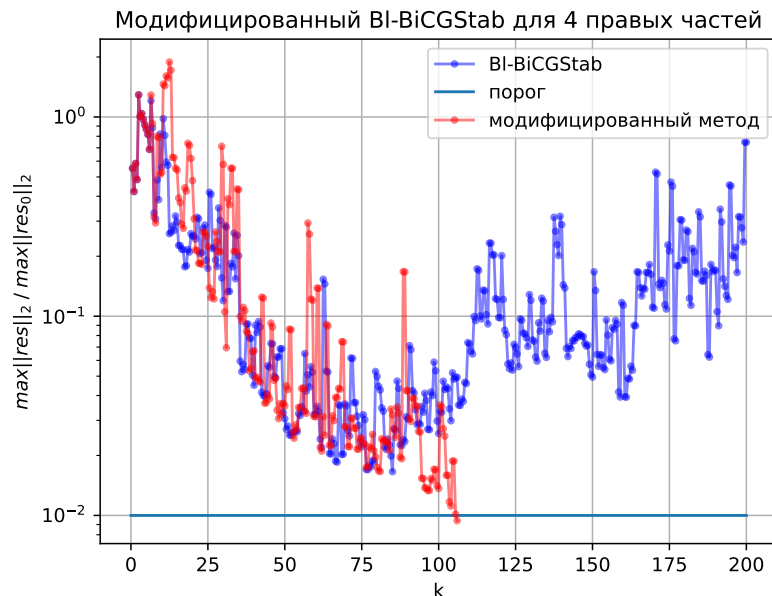


Рис. 2

Первый тест демонстрирует, что метод из статьи [4] не достигает требуемой точности, в то время как версия с улучшениями, описанными в главе 3, сходится. Эксперимент проводился в одинарной точности для четырех правых частей с номерами: 0, 90, 180, 270. Его результаты представлены на рис.2

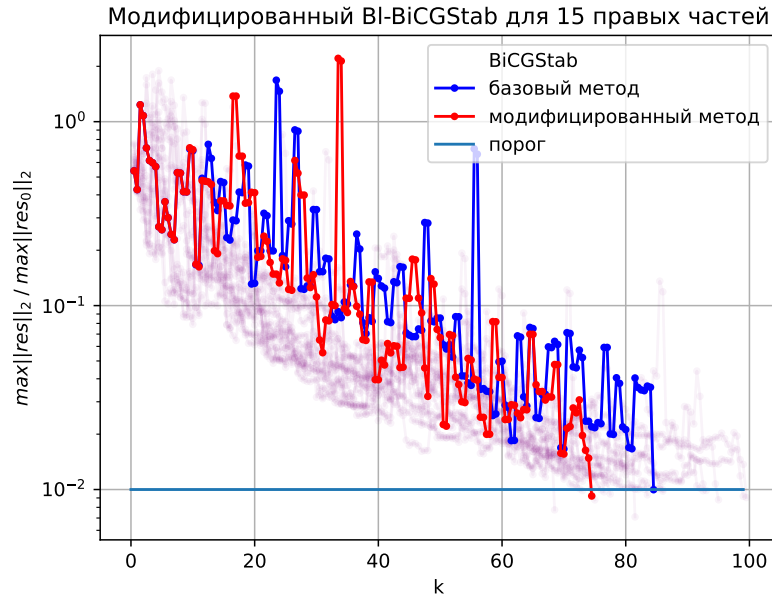


Рис. 3

Второй тест демонстрирует, что улучшения, описанные в главе 3 позволяют получить выгоду по количеству умножений матрицы системы на вектор, 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 [4], красным - метод с улучшениями из главы 3. Для решения этой задачи стабилизированными бисопряженными градиентами было потрачено 2525 матрично-векторных умножений (МВУ), для решения методом из статьи [4] - 2535, модифицированный метод сошелся за 2235 МВУ, таким образом выгода составил 12% по сравнению с неблочной версией.

Однако количество итераций даже при всех предложенных улучшениях все равно велико, так что было принято решение рассмотреть алгоритм на основе метода квази-минимальных невязок, описанный в главе 4.

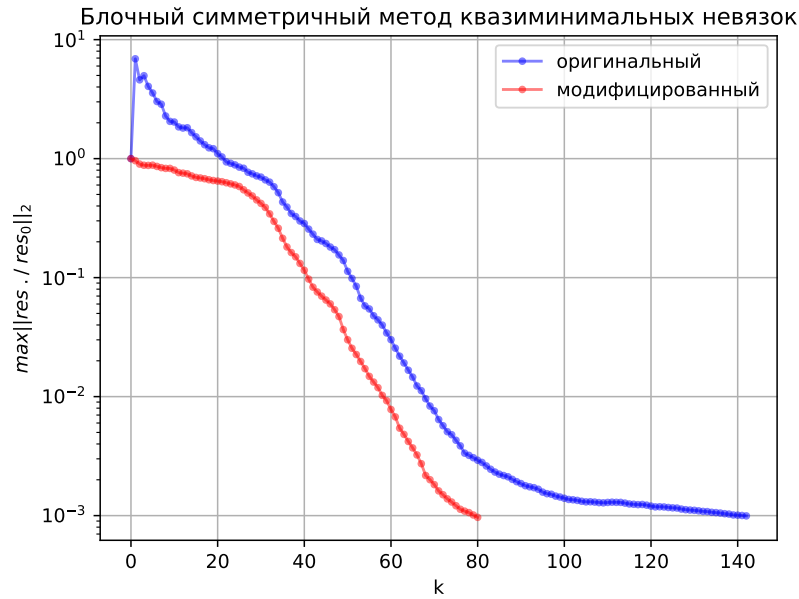


Рис. 4

На рис.4 показано уменьшение максимальной относительной невязки в блоке в зависимости от числа итераций, синяя кривая соответствует алгоритму из статьи [5], красная - модифицированному алгоритму из главы 4. Эксперимент производился в двойной точности с 45 правыми частями, остановка происходила при достижении порога 10^{-3} для демонстрации различия в сходимости двух методов. Примечательным моментом является скачок на первой итерации для метода из статьи [5], которого нет в модифицированной версии по причинам, освещенным в конце главы 4.

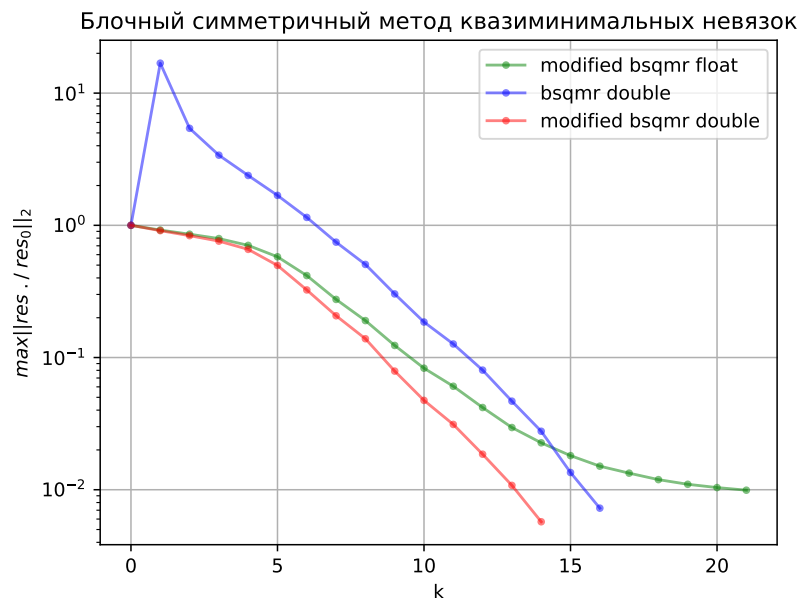


Рис. 5

На рис.5 представлены результаты расчета со всеми 722 правыми частями одновременно. Синий график представляет алгоритм из статьи [5], красный и зеленый графики - его модификацию из главы 4. Причем расчёты для синей и красной кривых выполнены

в арифметике с двойной точностью, а для зелёной - с одинарной. Немодифицированный алгоритм в одинарной точности уже на первых итерациях показывает сильную расходимость, поэтому эти расчёты не включены на график.

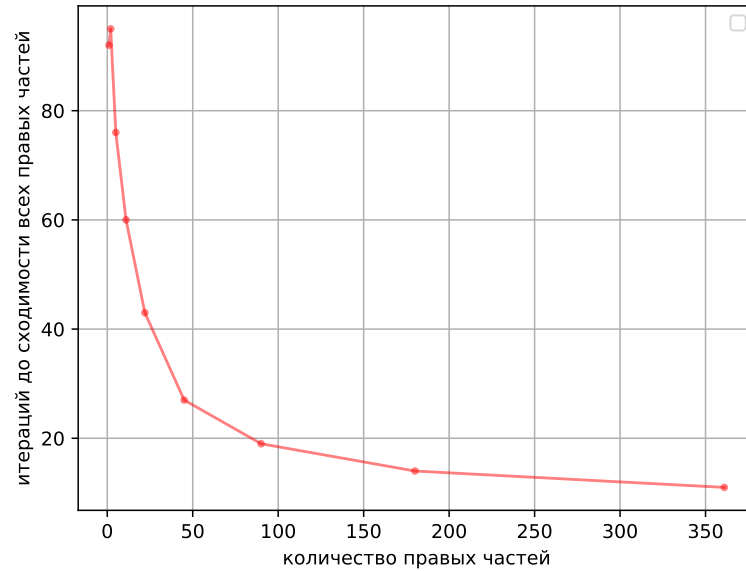


Рис. 6: Количество итераций модифицированного блочного симметричного метода квазимиимальных невязок в зависимости от количества задействованных правых частей

На рис.6 изображена зависимость количества итераций блочного симметричного метода квазимиимальных невязок в зависимости от количества задействованных правых частей для первых 361 правой части в задаче электромагнитного рассеяния [6]. Видно, что количество итераций уменьшается с увеличением размера блока, следовательно, уменьшается и размер задействованного для решения крыловского пространства.

6 Заключение

Результаты

Нерешенные проблемы редукции блока

Список литературы

- [1] *Saad, Yousef*. Iterative Methods for Sparse Linear Systems / Yousef Saad. — 2nd edition. — Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [2] *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>.
- [3] *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>.
- [4] *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>.
- [5] *Boyse, William E.* A Block QMR Method for Computing Multiple Simultaneous Solutions to Complex Symmetric Systems / William E. Boyse, Andrew A. Seidl // *SIAM Journal on Scientific Computing*. — 1996. — Vol. 17, no. 1. — Pp. 263–274. <https://doi.org/10.1137/0917019>.
- [6] *Stavtsev, S. L.* Application of Mosaic-Skeleton Approximations for Solving EFIE / S. L. Stavtsev, E. E. Tyrtysnikov // Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS) 2009 Proceedings. — PIERS Proceedings. — Moscow, Russia: The Electromagnetics Academy, 2009. — Abstracts published in PIERS 2009 Moscow (ISBN 978-1-934142-09-7). <https://piers.org/proceedings/piers2009proc.html>.