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.

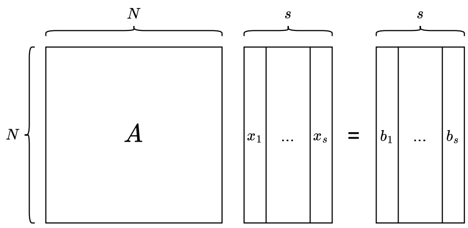
Abstract

Block BiCGStab and his friends

Содержание

1 Введение

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



$$AX = B,$$

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

Как уже было сказано рассматриваемые нами методы базируются на пространстве Крылова, давайте определим его.

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

Все рассматриваемые в дальнейшем методы являются проекционными процессами. Их суть заключается в том, что приближенное решение ищется в каком-то подпространстве

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. По сути алгоритм на каждом шаге ортогонализует

Алгоритм 1 Алгоритм Арнольди

```
Выберем v_1 = v/||v||_2, так что ||v_1||_2 = 1

for j = 1, 2, ..., m do
    for i = 1, 2, ..., j do
        h_ij ← (Av_j, v_i)
    end for
    w_j ← Av_j − Σ_{i=1}^{j} h_ij v_i
    h_{j+1,j} ← ||w_j||_2
    if h_{j+1,j} = 0 then
        Stop
    end if
    v_{j+1} ← w_j / h_{j+1,j}
end for
```

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 $v_1,...,v_m$; $\overline{H}_m$ - $(m+1) \times (m)$ хессенбергова матрица с элементами h_{ij} из алгоритма 1; H_m - $m \times m$ матрица, получающаяся из $\overline{H}_m$ путем удаления последней строки. Тогда, процедура Арнольди влечет следующие соотношения:

$$AV_m = V_m H_m + w_m e_m^T \tag{1}$$

$$= V_{m+1}\overline{H}_m, \tag{2}$$

$$V_m^T A V_m = H_m \tag{3}$$

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 итерационные соотношения в теле Алгоритма 2

Алгоритм 2 Симметричный алгоритм Ланцоша

Выберем $v_1 = v/\|v\|_2$, так что $\|v_1\|_2 = 1$
$\beta_1 \leftarrow 0$, $v_0 \leftarrow 0$
for $j = 1, 2, \ldots, m$ **do**
  $w_j \leftarrow Av_j - \beta_j v_{j-1}$
  $\alpha_j \leftarrow (w_j, v_j)$
  $w_j \leftarrow w_j - \alpha_j v_j$
  $\beta_{j+1} \leftarrow \|w_j\|_2$
  if $\beta_{j+1} = 0$ **then**
    Stop
  end if
  $v_{j+1} \leftarrow w_j/\beta_{j+1}$
end for

При этом матрица T_m имеет вид:

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

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, $i = 1,...,m$. На m-ом шаге алгоритма приближенное решение ищется в аффинном пространстве $x_0 + K_m$, где $K_m\left(A,r_0\right) \equiv \{r_0, Ar_0, A^2r_0, ..., A^{m-1}r_0\}$, $r_0 = b - Ax_0$. На невязки при этом налагается условие

$$b - Ax_m \perp K_m. \tag{5}$$

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, $i = 1,...,m$:

$$x_m = x_0 + V_m y_m. \tag{6}$$

Это выражение эквивалентно равенству:

$$r_m = r_0 - AV_m y_m, \tag{7}$$

домножим слева на V_m^T:

$$V_m^T r_m = V_m^T r_0 - V_m^T A V_m y_m. \tag{8}$$

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

$$y_m = T_m^{-1} \beta e_1. \tag{9}$$

Получим выражение дял r_m:

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

$$r_m = -h_{m+1,m} e_m^T y_m v_{m+1}. \tag{10}$$

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

$$\begin{aligned} &P_m U_m = V_m \\ &p_m \eta_m + \beta_m p_{m-1} = v_m \\ &p_m = \eta_m^{-1} (v_m - \beta_m p_{m-1}) \end{aligned}$$

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:

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

Как результат получаем формулу для обновления x_m:

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

Покажем, что столбцы P_m образуют A-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:

$$\begin{aligned} P_m^T A P_m &= U_m^{-T} V_m^T A V_m U_m^{-1} && (14) \\ &= U_m^{-T} T_m U_m^{-1} && (15) \\ &= U_m^{-T} L_m && (16) \end{aligned}$$

$U_m^{-T} L_m$ - 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. [1]

2.4 Метод бисопряженных градиентов

[1]

2.5 Стабилизированный метод бисопряженных градиентов

[2]

2.6 Блочный метод сопряженных градиентов

[3]

2.7 Блочный метод бисопряженных градиентов

[3]

2.8 Блочный стабилизированный метод бисопряженных градиентов

[4]

2.8.1 Матричнозначные полиномы

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

2.8.2 Алгоритм

2.9 Блочный симметричный метод квазиминимальных невязок

3 Улучшения блочного метода стабилизированных бисопряженных градиентов

В данной главе предложены изменения, направленные на улучшение стабильности блочного метода бисопряженных 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:

$$C(\mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1}) = 0, \tag{17}$$

$$C^{(1)}(\mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k) = 0. \tag{18}$$

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

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

Тогда выражение (17) можно представить в виде:

$$\tilde{R}_0^* S_k = 0. \tag{19}$$

В точной арифметике это соотношение выполняется строго, однако при вычислениях на компьютере соотношение (19) 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:

$$S_k^r = S_k - AP_k\alpha_k^r. \tag{20}$$

При этом мы стремимся поддерживать соотношение $\tilde{R}_0^* S_k^r = 0$ с уточненным блоком S_k^r. Тогда, домножая обе части выражения (20) слева на $\tilde{R}_0$, получим уравнение для поправки α_k^r:

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

Поработаем теперь над выражением (18). Используя полиномиальное соотношение для P_{K+1}, получаем следующее выражение:

$$t\mathbf{Q}_k \mathbf{P}_{k+1} = t\mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1} + t\mathbf{Q}_k \mathbf{P}_k. \tag{21}$$

Введем обозначение $W_k \equiv (t\mathbf{Q}_k \mathbf{R}_{k+1})(A) \circ R_0$. Тогда выражение (21) можно записать в матричном виде:

$$W_k = AS_k + AP_k\beta_k. \tag{22}$$

Тогда выражение (18) можно представить в виде:

$$\tilde{R}_0^* W_k = 0. \tag{23}$$

Аналогично получаем соотношения реортогонализации для (23):

$$W_k^r = W_k + AP_k\beta_k^r$$

Поправка β_k определяется уравнением:

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

Следующим шагом получим формулу для вычисления P_{k+1} с учетом введённых 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:

$$R^r_{k+1} = R_{k+1} - \omega^r_k T_k$$

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

3.2 Ортогонализация векторов направлений и проверочных невязок

Вспомним вид алгоритма [4], в блоке Алгоритм 3 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

Алгоритм 3 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 $k = 0, 1, 2, ...$ **do**
  решить $\tilde{R}_0^T A P_k \alpha_k = \tilde{R}_0^T R_k$
  $S_k = R_k - AP_k\alpha_k$
  $T_k = AS_k$
  $\omega_k = \frac{\langle T_k, S_k\rangle_F}{\langle T_k, T_k\rangle_F}$
  $X_{k+1} = X_k + P_k\alpha_k + \omega_k S_k$
  $R_{k+1} = S_k - \omega_k T_k$
  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 3, $\tilde{R}_0$ - 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 $\tilde{R}_0 \to Q_R$.

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 4 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 $k = 0, 1, ...$ **do**
  $P_k = QU$ - QR-разложение P_k;
  $P_k \to P_k U^{-1}$;
  $V_k = AP_k$;
  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 $(\tilde{R}_0^* V_k)\alpha_k = \tilde{R}_0^* \hat{S}_k$;
  $S_k = \hat{S}_k - V_k\alpha_k$;
  $T_k = AS_k$;
  $\hat{\omega}_k =< S_k,T_k >_F / < T_k,T_k >_F$;
  $\hat{R}_{k+1} = S_k - \hat{\omega}_k T_k$;
  $\omega_k =< \hat{R}_{k+1}, T_k >_F / < T_k, T_k >_F$;
  $R_{k+1} = \hat{R}_{k+1} - \omega_k T_k$;
  $X_{k+1} = X_k + P_k(\hat{\alpha}_k + \alpha_k) + (\hat{\omega}_k + \omega_k)S_k$;
  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

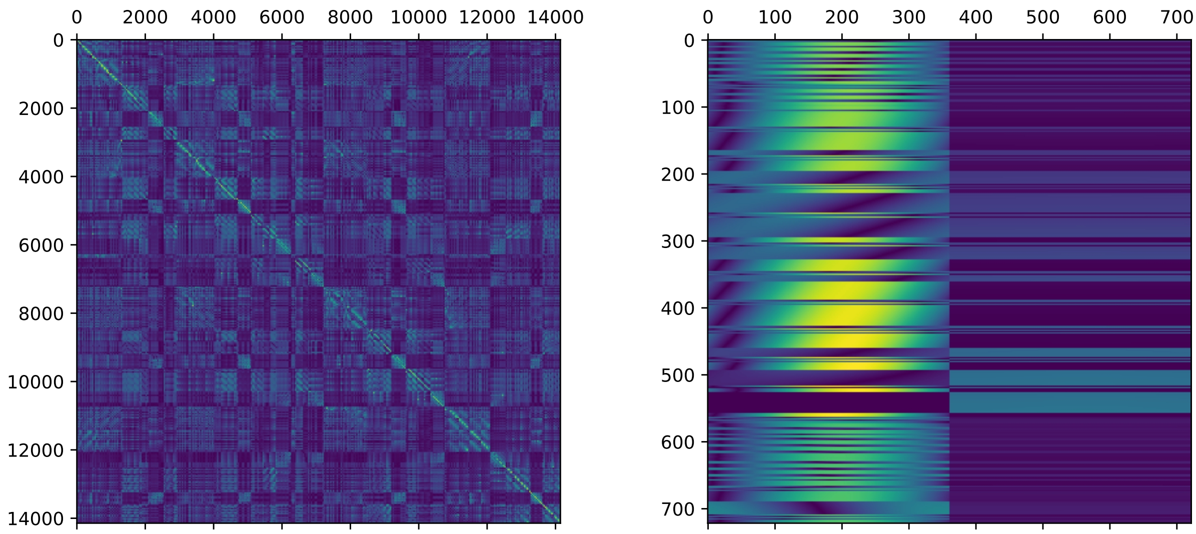
3.5 Проблемы

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 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.



(a) (b)

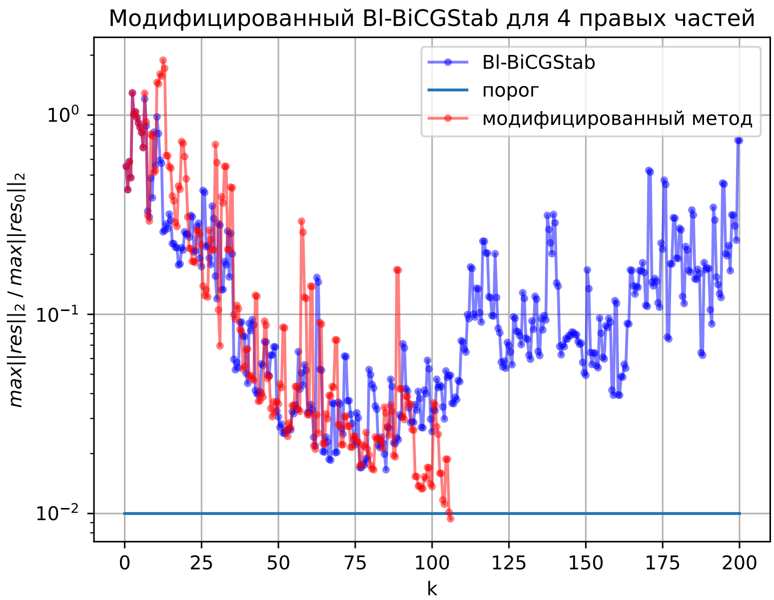


Рис. 2

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

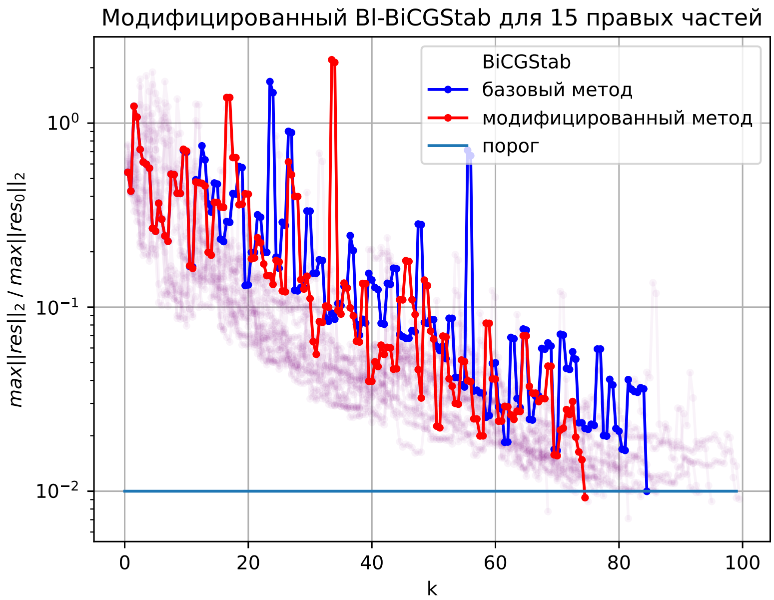


Рис. 3

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 абцисс - количество иттераций, 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

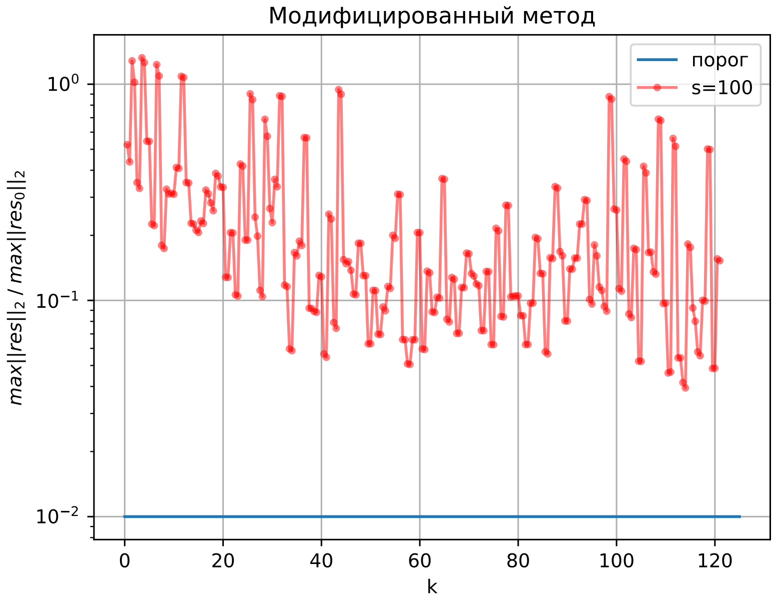

Модифицированный метод
порог
s=100
$max||res||_2$ / $max||res_0||_2$
k
10^0
10^{-1}
10^{-2}
0
20
40
60
80
100
120

Рис. 4

5 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.