Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 268, 2000 г.

С. А. Харченко, А. Ю. Еремин

НОВЫЕ АЛГОРИТМЫ ТИПА GMRES(K) С ЯВНЫМИ РЕСТАРТАМИ И АНАЛИЗ ИХ СВОЙСТВ СХОДИМОСТИ НА ОСНОВЕ QR ФОРМЫ МАТРИЧНЫХ СООТНОШЕНИЙ

1. Введение

Необходимость решения больших разреженных линейных систем с несимметричными или незнакоопределенными матрицами коэффициентов возникает во многих научных и прикладных задачах. Обычно для этих целей применяются итерационные методы с переобуславливанием. Обширная литература посвящена проблемам построения качественных схем переобуславливания. Однако эффективность результирующего итерационного метода, а часто и выбор конкретной схемы переобуславливания, сильно зависит от свойств применяемой базисной итерационной схемы.

Хорошо известно, что с точки зрения свойств сходимости и чувствительности к ошибкам округления наиболее привлекательным в подобных случаях является метод обобщенных минимальных невязок GMRES [6] без рестартов. Однако в большинстве работ [2, 7], посвященных рассматриваемой проблематике, используются метод обобщенных минимальных невязок GMRES с рестартами или методы типа BiCGSTAB [9] и QMR [3], основанные, в отличие от метода GMRES, на идеях квазиминимизации. Использование базисных итерационных схем с существенно более бедными свойствами сходимости очевидно связано с необходимостью значительного сокращения затрат метода GMRES.

Так, например, использование метода GMRES(100) во многих случаях является практически неприемлемым из-за огромных вычислительных затрат, необходимых для ортогонализации базиса соответствующего подпространства Крылова, а также из-за необходимости хранения в памяти в явном виде этого ба-

Данная работа была частично поддержана по гранту NWO 047-008-007, Нидерланды.

зиса. При этом часто не удается добиться сходимости переобусловленных итерационных методов за 100 итераций при решении многих плохообусловленных несимметричных и/или незнакоопределенных систем линейных алгебраических уравнений. Однако переход к использованию итерационных схем, основанных на идее квазиминимизации, часто приводит к столь значительной потере скорости сходимости, что становится весьма актуальной проблема построения базисной итерационной схемы, обладающей свойствами сходимости, близкими к свойствам сходимости метода GMRES, но со значительно меньшими вычислительными затратами и затратами памяти.

Известно несколько попыток [1, 4, 5] разработки подобных методов; все они тесно связаны с идеей неявных рестартов в методе GMRES. Однако, по нашему мнению, их нельзя признать успешными, поскольку получаемые свойства сходимости по-прежнему сильно уступают в интересующих нас случаях свойствам сходимости метода GMRES без рестартов. Сравнительный анализ этих попыток можно найти в Разделах 3, 4 и 5 данной работы.

В настоящей работе предлагается использовать совершенно иную идею, а именно: для решения поставленной задачи мы предлагаем использовать метод типа GMRES с явными рестартами, в котором внутренние итерации и фильтрация получаемых направлений перед рестартом организованы таким образом, чтобы от рестарта к рестарту в матричных соотношениях одновременно эффективно накапливалась информация о текущем приближении к решению, а также спектральная/сингулярная информация, позволяющая поддерживать высокую скорость сходимости, сравнимую со скоростью сходимости алгоритма GMRES без рестартов. Подобная идея в отличие от известных подходов позволяет построить в интересующих нас случаях конструктивную теорию сходимости, которая является надежной основой для разработки эффективных процедур фильтрации базисов подпространств Крылова. Показано (см. Раздел 4), что подобная базисная схема с явными рестартами может обладать свойствами сходимости, близкими к оригинальному методу обобщенных минимальных невязок без рестартов.

Работа построена следующим образом. В Разделе 2 вводится в рассмотрение QR форма матричных соотношений и описаны некоторые ее полезные свойства. Раздел 3 содержит описание метода SOFGMRES(m) (GMRES with initial Subspace, Orthonormal columns and Filtration). Раздел 4 посвящен исследованию свойств сходимости этого метода, а возможные процедуры фильтрации подпространства описаны в Разделе 5. В Разделе 6 описаны результаты численных экспериментов и содержатся заключительные замечания.

2. Алгоритм GMRES и QR форма матричных соотношений

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b, \tag{2.1}$$

где $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ – заданная невырожденная, возможно незнакоопределенная несимметричная матрица, $b \in \mathbb{R}^N$ – заданный вектор правой части, $x \in \mathbb{R}^N$ – неизвестный вектор. В дальнейшем при обсуждении итерационных алгоритмов решения (2.1) будем предполагать, что переобуславливатель и ненулевое начальное приближение, если таковые имеются, уже учтены соответствующим образом в A и b. Поэтому без ограничения общности мы будем рассматривать только систему (2.1) с нулевым начальным приближением.

Для удобства изложения приведем хорошо известный итерационный алгоритм GMRES(k) [6] решения системы (2.1), который с небольшими модификациями может быть описан следующим образом:

Алгоритм 2.1. GMRES(k):

Step 0. Инициализация:

$x_0 = 0$;

For $s = 1, \dots, s_{\max}$ Do (Внешний цикл: рестарты)

$r_0 = b - Ax_0,\ \ r_0 = p_1\gamma_1,\ \ p_1^T p_1 = 1$;

For $i = 1, \dots, k$ Do (Внутренний цикл: итерации алгоритма Арнольди)

Step 1. Умножение на матрицу:

$$\widetilde{p}_{i+1} = Ap_i;$$

Step 2. Ортогонализация:

$$\widetilde{p}_{i+1} = \sum_{j=1}^{i} p_j h_{ji} + p_{i+1} h_{i+1,i},$$

$$p_{i+1}^T p_j = 0, \quad j = 1, \ldots, i, \quad \|p_{i+1}\| = 1;$$

$$H_i = \begin{bmatrix} h_{11} & \ldots & \ldots & h_{1i} \\ h_{21} & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & h_{ii} \\ 0 & & & h_{i+1,i} \end{bmatrix}, \quad P_{i+1} = [P_i, p_{i+1}];$$

End For

Step 3. Решение локальной задачи минимизации:

$$\text{Solve} \left\| \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ 0 \end{bmatrix} - H_k z_k \right\| \to \min_{z_k};$$

Step 4. Вычисление нового приближения к решению:

$$x_k = x_0 + P_k z_k;$$

Step 5. Вычисление редуцированной невязки:

$$t_k = \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ 0 \end{bmatrix} - H_k z_k;$$

If $(\|t_k\| \le \varepsilon)$ Stop

Переобозначим $x_0 := x_k$

End For

В результате выполнения k итераций Арнольди на **Step 2** Алгоритма 2.1 вычисляется ортонормированный базис подпространства Крылова, удовлетворяющий в случае $x_0 = 0$ следующим матричным соотношениям:

$$\begin{cases} AP_k = P_{k+1} H_k, \\ P_{k+1}^T P_{k+1} = I_{k+1}, \\ b = P_{k+1} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{cases} \tag{2.2}$$

Введем обозначения

$$Y_k = P_k, \quad \gamma_{k+1} = \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{2.3}$$

В этих обозначениях соотношения (2.2) можно написать в виде:

$$\begin{cases} AY_k = P_{k+1}H_k, \\ Y_k^T Y_k = I_k, \\ P_{k+1}^T P_{k+1} = I_{k+1}, \\ b = P_{k+1}\gamma_{k+1}, \end{cases} \tag{2.4}$$

где $Y_k \in \mathbb{R}^{N\times k}$, $P_{k+1} \in \mathbb{R}^{N\times(k+1)}$, $H_k \in \mathbb{R}^{(k+1)\times k}$ – верхняя хессенбергова матрица, $\gamma_{k+1} \in \mathbb{R}^{k+1}$.

Определение 2.1. *Пусть $k \geq 0$. Если для некоторых матриц Y_k и P_{k+1}, верхней хессенберговой матрицы H_k и вектора γ_{k+1} соответствующих размеров имеют место соотношения* (2.4)*, то мы будем говорить, что выполнены начальные матричные соотношения.*

Алгоритм Арнольди является одним из способов построения начальных матричных соотношений, при этом в результате $Y_k = P_k$. Ниже будут приведены другие способы построения начальных матричных соотношений, для которых равенство $Y_k = P_k$ уже не имеет места.

Матрица H_k в соотношениях (2.4) по предположению верхняя хессенбергова, поэтому существует набор вращений Гивенса $G_i \in \mathbb{R}^{(k+1)\times(k+1)}$, $i = 1, \ldots, k$,

$$G_i = \begin{bmatrix} I_{i-1} & & & 0 \\ & c_i & s_i & \\ & -s_i & c_i & \\ 0 & & & I_{k-i} \end{bmatrix}, \quad c_i^2 + s_i^2 = 1,$$

такой, что

$$H_k = Q_k \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{2.5}$$

где

$$Q_k = G_1 \cdots G_k \tag{2.6}$$

– ортогональная матрица, которая представляет собой произведение вращений Гивенса, R_k – верхняя треугольная матрица. Равенство (2.5) является QR-разложением матрицы H_k.

Обозначим

$$W_k = P_{k+1} Q_k \begin{bmatrix} I_k \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{2.7}$$

тогда первое равенство из (2.4) можно переписать в виде

$$AY_k = W_k R_k. \tag{2.8}$$

Объединяя (2.4), (2.7) и (2.8), получаем соотношения

$$\begin{cases} AY_k = W_k R_k, \\ Y_k^T Y_k = I_k, \\ W_k^T W_k = I_k, \\ b = P_{k+1}\gamma_{k+1}. \end{cases} \tag{2.9}$$

Определение 2.2. *Соотношения* (2.9), (2.5) *и* (2.7) *будем называть QR формой начальных матричных соотношений* (2.4).

Выбор такого названия соотношений (2.9) связан с тем, что в правой части (2.8) стоит произведение матрицы W_k с ортонормированными столбцами на верхнюю треугольную матрицу R_k, т.е. соотношение (2.8) является QR разложением матрицы AY_k.

В дальнейшем нам потребуются следующие простые свойства QR формы начальных матричных соотношений.

Утверждение 2.1. *Сингулярные числа матриц A и R_k удовлетворяют неравенствам теоремы Коши о разделении.*

Доказательство. Матрицы Y_k и W_k имеют ортонормированные столбцы. Пусть $Y_k^\perp$ является дополнением к Y_k (соответственно $W_k^\perp$ является дополнением к W_k) до ортонормированного базиса в $\mathbb{R}^N$. Из (2.8) следует равенство

$$A[Y_k, Y_k^\perp] = [W_k, W_k^\perp] \begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}$$

для некоторых матриц R_k^I и R_k^{II} соответствующих размерностей. Тогда получаем, что матрица A ортогональными преобразованиями может быть приведена к виду $\begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}$, т.е. их сингулярные числа совпадают. С другой стороны, сингулярные числа матрицы $\begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}$ суть квадратные корни собственных чисел симметричной матрицы

$$\begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} R_k^T R_k & R_k^T R_k^I \\ (R_k^I)^T R_k & (R_k^I)^T R_k^I + (R_k^{II})^T R_k^{II} \end{bmatrix}.$$

Симметричная матрица $R_k^T R_k$ есть главная подматрица симметричной матрицы

$$\begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix},$$

поэтому для собственных чисел этих двух матриц имеют место неравенства теоремы Коши о разделении. Учитывая, что квадратные корни собственных чисел матрицы $R_k^T R_k$ суть сингулярные числа R_k, получаем требуемое утверждение. □

Следствие 2.1. *Матрица R_k из* (2.8) *является невырожденной матрицей.*

Доказательство. Поскольку A является невырожденной матрицей, то $\sigma_{\min}(A) > 0$. Но из Утверждения 2.1 следует неравенство

$$\sigma_{\min}(R_k) \geq \sigma_{\min}(A).$$

□

3. Алгоритм SOFGMRES(m)

В этом разделе мы предлагаем итерационный алгоритм решения системы (2.1), основанный на матричных соотношениях (2.4).

Как уже отмечалось во введении, ранее предпринималось несколько попыток избежать быстрого роста затрат в алгоритме GMRES(k) при увеличении числа итераций k внутреннего цикла алгоритма и по возможности не потерять его свойства сходимости. Все эти подходы связаны с попытками сохранения некоторой спектральной информации при явных или неявных рестартах. В частности, в алгоритме GMRESE [4] сохраняются некоторые вектора, являющиеся приближениями к собственным векторам исходной матрицы. В результате возникают соотношения типа соотношений (2.4) за исключением условия $Y_k^T Y_k = I_k$, которое в данном случае не выполнено.

В работах [1] и [5] предложен алгоритм типа GMRES(k) с неявными рестартами. Идея этого алгоритма основана на использовании итераций Арнольди с неявными рестартами [8]. Для текущих соотношений (2.2) алгоритма Арнольди вычисляются значения Ритца, которые являются приближениями к собственным значениям матрицы A. Из этих значений выбирается некоторое подмножество, а затем матричные соотношения алгоритма Арнольди преобразуются таким образом, чтобы преобразованные соотношения были также соотношениями алгоритма Арнольди, но уже для другого, специальным образом построенного, начального вектора. В этом случае преобразованные соотношения содержат спектральную информацию только для выбранных значений Ритца, а значит содержат меньшее количество столбцов. В этом подходе при последующих итерациях с неявными рестартами приближенная спектральная информация о части собственных пар матрицы A может уточняться. Результирующие матричные соотношения используются для построения приближения к решению.

В отличие от упомянутых выше подходов в данной работе на основе матричных соотношений в QR форме (2.9) мы предлагаем при явном рестарте алгоритма явно сохранять в Y_k часть спектральной информации и информацию о приближенном решении.

Для изложения нам потребуется описать еще один способ построения начальных матричных соотношений (2.4), для которого $Y_k \neq P_k$.

Пусть задан некоторый набор линейно независимых векторов f_i, $i = 1, \ldots, k$. Обозначим

$$F_k = [f_1, \ldots, f_k].$$

Вычислим QR разложение матрицы

$$F_k = U_k Z_k,$$

где Z_k – верхняя треугольная матрица, а U_k – матрица с ортонормированными столбцами. Положим $Y_k = U_k$. Умножим Y_k на матрицу A и построим QR разложение матрицы $[AY_k, b]$:

$$[AY_k, b] = P_{k+1} \left[\begin{array}{c|c} R_k & \gamma_{k+1} \\ 0 & \end{array} \right]. \tag{3.1}$$

Полагая $H_k = \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix}$, получим, что построенные таким образом Y_k, P_{k+1}, γ_{k+1} и H_k удовлетворяют начальным матричным соотношениям (2.4). При этом в данном случае матрица H_k изначально верхняя треугольная, поэтому соответствующие вращения Гивенса есть единичные матрицы размера $(k+1) \times (k+1)$, а для матрицы W_k из (2.7) получаем равенство $W_k = P_k$. Тем не менее, вообще говоря, $Y_k \neq P_k$.

Для дальнейшего изложения нам также понадобятся некоторые дополнительные обозначения. Пусть r_{k+j-1}, $j = 1, \dots, i$, есть некоторый набор векторов невязок. Рассмотрим матрицу $[Y_k, r_k, \dots, r_{k+i-1}]$, ее QR разложение имеет следующий вид:

$$[Y_k, r_k, \dots, r_{k+i-1}]$$
$$= [Y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+i}] \begin{bmatrix} \underline{I_k \,|} & g_{1,k+1} & \cdots & g_{1,k+i} \\ & \vdots & & \vdots \\ & g_{k+1,k+1} & & \vdots \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & g_{k+i,k+i} \end{bmatrix}. \tag{3.2}$$

Из (3.2), в частности, следует равенство

$$r_{k+i-1} = [Y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+i}] \begin{bmatrix} g_{1,k+i} \\ \vdots \\ g_{k+i,k+i} \end{bmatrix}. \tag{3.3}$$

Соотношения (2.2) можно записать в виде

$$[b, AP_k] = P_{k+1} \left[\begin{matrix} \gamma_1 \\ 0 \end{matrix} \,\middle|\, H_k \right]. \tag{3.4}$$

Учитывая, что в векторе $\begin{bmatrix} \gamma_1 \\ 0 \end{bmatrix}$ только первая компонента может быть ненулевой, а H_k – верхняя хессенбергова матрица, получаем, что равенство (3.4) есть QR разложение матрицы $[b, AP_k]$, поскольку P_{k+1} является матрицей с ортонормированными столбцами, а $\left[\begin{matrix} \gamma_1 \\ 0 \end{matrix} \,\middle|\, H_k \right]$. – верхняя треугольная матрица.

Теперь сравним соотношения (3.1) и (3.4). В обоих случаях эти соотношения представляют собой QR разложение матрицы, столбцами которой являются вектор b и векторы матрицы AY_k; различаются эти равенства выбором Y_k и положением вектора правой части b в QR разложении. Более того, в обоих случаях получаем, что для соответствующих матриц выполнены начальные матричные соотношения (2.4).

В соотношениях (3.1) и (3.4) вектор правой части b находится в QR разложении в $(k+1)$-м и 1-м столбцах соответственно. Пусть теперь k_* – некоторое целое число в пределах от 1 до $k+1$. Вычислим QR разложение матрицы $[AY_{k_*-1}, b, Ay_{k_*}, \dots, Ay_k]$ в виде

$$[AY_{k_*-1}, b, Ay_{k_*}, \dots, Ay_k] =$$

$$P_{k+1}\left[\begin{array}{cc|cccc} \underline{R_{k_*-1}|} & & h_{1,k_*+1} & \dots & h_{1,k+1} & \\ & & \vdots & & \vdots & \\ & \gamma_{k_*} & h_{k_*,k_*+1} & & \vdots & \\ & & h_{k_*+1,k_*+1} & \ddots & \vdots & \\ & & & \ddots & h_{k,k+1} & \\ 0 & & & & & h_{k+1,k+1} \end{array}\right]. \tag{3.5}$$

Положив

$$\gamma_{k+1} = \begin{bmatrix} \gamma_{k_*} \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$H_k = \begin{bmatrix} \underline{R_{k_*-1}|} & h_{1,k_*+1} & \dots & h_{1,k+1} \\ & \vdots & & \vdots \\ & h_{k_*,k_*+1} & & \vdots \\ & h_{k_*+1,k_*+1} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & h_{k,k+1} \\ 0 & & & h_{k+1,k+1} \end{bmatrix},$$

получим, что и в этом случае имеют место начальные матричные соотношения (2.4). Пусть теперь $y_{k+1}, \dots, y_{k+i}$ – векторы из QR разложения (3.2). Рассмотрим QR разложение матрицы

$$[AY_{k_*-1}, b, Ay_{k_*}, \ldots, Ay_k, \ldots, Ay_{k+i}] =$$

$$[P_{k+1}, p_{k+2}, \ldots, p_{k+i+1}] \times \tag{3.6}$$

$$\left[\begin{array}{cc|ccccc}
\underline{R_{k_*-1}|} & & h_{1,k_*+1} & \cdots & h_{1,k+1} & \cdots & h_{1,k+i+1} \\
 & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
 & \gamma_{k_*} & h_{k_*,k_*+1} & & \vdots & & \vdots \\
 & & h_{k_*+1,k_*+1} & \ddots & \vdots & & \vdots \\
 & & & \ddots & h_{k,k+1} & & \vdots \\
 & & & & h_{k+1,k+1} & \ddots & \vdots \\
 & & & & & \ddots & h_{k+i,k+i+1} \\
0 & & & & & & h_{k+i+1,k+i+1}
\end{array}\right],$$

из которого, в частности, следует равенство

$$Ay_{k+i} = [P_{k+1}, p_{k+2}, \ldots, p_{k+i+1}] \begin{bmatrix} h_{1,k+i+1} \\ \vdots \\ h_{k+i+1,k+i+1} \end{bmatrix}. \tag{3.7}$$

Во введенных обозначениях предлагаемый алгоритм можно записать следующим образом:

Алгоритм 3.1. <u>SOFGMRES(m)</u> (GMRES with initial Subspace, Orthonormal columns and Filtration).

Step 0. Инициализация:
$x_0 = 0$;
Пусть для некоторых k_* и k, $1 \le k_* \le k+1$, имеют место начальные матричные соотношения (2.4) и равенство (3.5);
For $s = 1, \ldots, s_{\max}$ **Do** (Внешний цикл: рестарты)

Stage I: <u>Построение расширенных матричных соотношений</u>

For $i = 1, \ldots, m$ Do (Внутренний цикл)

Step 1. Решение локальной задачи минимизации:

$$\|H_{k+i-1} z_{k+i-1} - \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}\| \to \min_{z_{k+i-1}}; \tag{3.8}$$

Step 2. Вычисление вектора редуцированной невязки:

$$t_{k+i-1} = \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix} - H_{k+i-1} z_{k+i-1}; \tag{3.9}$$

Step 3. Вычисление нового приближения к решению:

If $\|t_{k+i-1}\| \le \varepsilon$ then

$$x_{k+i-1} = Y_{k+i-1} z_{k+i-1}; \tag{3.10}$$

Stop

End If

Step 4. Вычисление вектора текущей невязки:

$$r_{k+i-1} = P_{k+i} t_{k+i-1}; \tag{3.11}$$

Step 5. Ортогонализация: для текущего вектора невязки r_{k+i-1} достраиваем QR разложение (3.2);

Step 6. Умножение матрицы на вектор направления y_{k+i}:

$$\widetilde{p}_{k+i} = A y_{k+i};$$

Step 7. Ортогонализация: для текущего вектора $\widetilde{p}_{k+i}$ достраиваем QR разложение (3.6);

Обозначим

$$Y_{k+i} = [Y_{k+i-1}, y_{k+i}], \qquad P_{k+i+1} = [P_{k+i}, p_{k+i+1}],$$

$$H_{k+i} = \left[\begin{array}{c|c} & h_{1,k+i+1} \\ & \vdots \\ H_{k+i-1} & h_{k+i,k+i+1} \\ \hline 0 & h_{k+i+1,k+i+1} \end{array} \right]$$

End For

End Stage I

В результате выполнения **Stage I**, после окончания итераций внутреннего цикла, получаем так называемые расширенные матричные соотношения:

$$\begin{cases} AY_{k+m} = P_{k+m+1} H_{k+m}, \\ Y_{k+m}^T Y_{k+m} = I_{k+m}, \\ P_{k+m+1}^T P_{k+m+1} = I_{k+m+1}, \\ b = P_{k+m+1} \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}, \end{cases} \tag{3.12}$$

где $Y_{k+m} \in \mathbb{R}^{N\times(k+m)}$, $P_{k+m+1} \in \mathbb{R}^{N\times(k+m+1)}$, $H_{k+m} \in \mathbb{R}^{(k+m+1)\times(k+m)}$ – верхняя хессенбергова матрица и $\begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{k+m+1}$.

Stage II: Фильтрация расширенных матричных соотношений

Step 8. Выбираем l, $1 \le l \le m$, и матрицу с ортонормированными столбцами $U_l \in \mathbb{R}^{m\times l}$, $U_l^T U_l = I_l$;

Step 9. Вычисляем новые векторы направлений: $[\widetilde{y}_{k+1}, \dots, \widetilde{y}_{k+l}] = [y_{k+1}, \dots, y_{k+m}]U_l$;

Step 10. Вычисляем векторы

$$A\widetilde{y}_{k+1}, \dots, A\widetilde{y}_{k+l};$$

Step 11. Достраиваем QR разложение (3.6) для матрицы

$$[AY_{k_*-1}, b, Ay_{k_*}, \dots, Ay_k, A\widetilde{y}_{k+1}, \dots, A\widetilde{y}_{k+l}];$$

End Stage II

В результате выполнения **Stage II** получаем так называемые отфильтрованные матричные соотношения:

$$\begin{cases} A\widetilde{Y}_{k+l} = \widetilde{P}_{k+l+1}\widetilde{H}_{k+l}, \\ \widetilde{Y}_{k+l}^T \widetilde{Y}_{k+l} = I_{k+l}, \\ \widetilde{P}_{k+l+1}^T \widetilde{P}_{k+l+1} = I_{k+l+1}, \\ b = \widetilde{P}_{k+l+1} \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}, \end{cases} \tag{3.13}$$

где $\widetilde{Y}_{k+l} = [Y_k, \widetilde{y}_{k+1}, \dots, \widetilde{y}_{k+l}]$, $\widetilde{Y}_{k+l} \in \mathbb{R}^{N\times(k+l)}$, $\widetilde{P}_{k+l+1} \in \mathbb{R}^{N\times(k+l+1)}$, $\widetilde{H}_{k+l} \in \mathbb{R}^{(k+l+1)\times(k+l)}$ – верхняя хессенбергова матрица и $\begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{k+l+1}$.

На следующей внешней итерации матричные соотношения (3.13) будем рассматривать как новые начальные матричные соотношения (2.4);

Restart: переобозначим $Y_{k+l} := \widetilde{Y}_{k+l}$, $P_{k+l+1} := \widetilde{P}_{k+l+1}$, $H_{k+l} := \widetilde{H}_{k+l}$, $\gamma_{k+l+1} := \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}$, $k := k + l$

End For

Таким образом, алгоритм SOFGMRES(m) имеет следующую структуру. На каждой итерации внешнего цикла по s исходя из начальных матричных соотношений (2.4) строятся расширенные матричные соотношения (3.12) за счет выполнения m итераций типа Арнольди. При выполнении итераций внутреннего цикла в отличие от стандартного алгоритма GMRES(k) здесь необходимо ортогонализовать столбцы двух матриц P_k и Y_k. После итераций внутреннего цикла расширенные матричные соотношения фильтруются, а затем отфильтрованные матричные соотношения (3.13) используются в качестве начальных матричных соотношений на следующей итерации внешнего цикла при рестарте.

Основная идея алгоритма SOFGMRES(m) состоит в том, чтобы организовать итерации внутреннего цикла и фильтрацию расширенных матричных соотношений таким образом, чтобы от рестарта к рестарту в соотношениях (2.4) одновременно эффективно накапливалась информация об уточненном приближении к решению, а также некоторая спектральная/сингулярная информация, позволяющая поддерживать высокую скорость сходимости, сравнимую со скоростью сходимости алгоритма GMRES без рестартов.

Вычисления в алгоритме SOFGMRES(m) можно несколько упростить. Заметим прежде всего, что на i-м шаге внутреннего цикла алгоритма SOFGMRES(m) вектор x_{k+i-1} нового приближения к решению вычисляется по формуле (3.10), поэтому для соответствующей невязки $r_{k+i-1} = b - Ax_{k+i-1}$ имеют место соотношения

$$r_{k+i-1} = b - Ax_{k+i-1} = P_{k+i}\begin{bmatrix}\gamma_{k+1}\\0\end{bmatrix} - AY_{k+i-1}z_{k+i-1} =$$

$$= P_{k+i}\left(\begin{bmatrix}\gamma_{k+1}\\0\end{bmatrix} - H_{k+i-1}z_{k+i-1}\right) = P_{k+i}t_{k+i-1},$$

что объясняет возникновение в алгоритме задачи минимизации (3.8) и формулы (3.11) для вычисления невязки.

Заметим также, что в алгоритме SOFGMRES(m) нет необходимости на каждом шаге внутреннего цикла явно решать задачу минимизации (3.8) для того, чтобы найти вектор z_{k+i-1} и затем вычислить редуцированную невязку t_{k+i-1} по формуле (3.9). Вектор z_{k+i-1} в явном виде надо вычислять только тогда, когда необходимо явно вычислить соответствующий вектор приближения к решению x_{k+i-1}. В остальных случаях вектор редуцированной невязки t_{k+i-1} вычисляется с использованием вращений Гивенса по формулам, отличным от (3.8) и (3.9).

По определению имеем

$$t_{k+i-1} = \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix} - H_{k+i-1} z_{k+i-1}.$$

Учитывая (2.5), предыдущее равенство можно переписать в виде

$$Q^T_{k+i-1} t_{k+i-1} = Q^T_{k+i-1} \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} R_{k+i-1} \\ 0 \end{bmatrix} z_{k+i-1}. \qquad (3.14)$$

Но вектор z_{k+i-1} есть решение задачи минимизации (3.8), поэтому первые $k+i-1$ строк в правой части (3.14) являются нулевыми. Теперь вектор редуцированной невязки t_{k+i-1} можно записать в виде

$$t_{k+i-1} = Q_{k+i-1} \left\langle Q^T_{k+i-1} \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix} \right\rangle, \qquad (3.15)$$

здесь использовано обозначение $\langle w \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \{w\}_k \end{bmatrix}$ для $w \in \mathbb{R}^k$. Учитывая равенство (2.6), получаем, что вектор редуцированной невязки t_{k+i-1} эффективнее всего вычислять следующим образом: на текущей итерации применяется одно вращение Гивенса G^T_{k+i-1} для получения вектора $Q^T_{k+i-1} \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}$; этот вектор сохраняется до следующей итерации, в его копии зануляются первые $k+i-1$ компонент и к результату применяются $k+i-1$ вращений Гивенса в соответствии с формулами (3.15) и (2.6).

4. Теория сходимости алгоритма SOFGMRES(m)

В алгоритме SOFGMRES(m) столбцы матрицы Y_k могут более не являться ортонормированным базисом подпространства Крылова. Таким образом, стандартная теория сходимости метода GMRES(k), основанная на анализе асимптотических свойств матричных многочленов [1], вообще говоря, не применима в рассматриваемом нами случае. Однако, благодаря замечательным свойствам QR формы матричных отношений, удается все же построить теорию сходимости алгоритма SOFGMRES(m) в общем случае несимметричных незнакоопределенных невырожденных матриц коэффициентов. Эта теория основана на двух содержательных утверждениях:

– об условиях монотонного падения нормы невязки на внутреннем цикле алгоритма SOFGMRES(m) при построении расширенных матричных соотношений;

– о скорости падения нормы невязки на внутреннем цикле алгоритма SOFGMRES(m) в зависимости от свойств спектральной/сингулярной характеризации подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ из начальных матричных соотношений.

Предлагаемая теория сходимости не является асимптотической и явно учитывает свойства конкретной правой части. Более того, построенная теория сходимости алгоритма SOFGMRES(m) является конструктивной в том смысле, что полученные оценки скорости падения нормы невязки удается использовать в Разделе 5 для построения квазиоптимальных процедур фильтрации расширенных матричных соотношений.

Изложение теории сходимости построено следующим образом. Сначала в Разделе 4.1 устанавливаются условия отсутствия обрыва внутренних итераций алгоритма SOFGMRES(m) при построении расширенных матричных соотношений, а также обсуждается процедура возможного устранения обрыва. Затем доказывается теорема 4.1 о пошаговом монотонном падении нормы невязки на внутренних итерациях. Затем в Разделе 4.2 вводится в рассмотрение спектральная/сингулярная характеризация подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ из начальных матричных соотношений. В теореме 4.2 получена оценка скорости сходимости внутренних итераций алгоритма SOFGMRES(m) в терминах этой спектральной/сингулярной характеризации.

4.1. Обрыв и монотонное падение нормы невязки на внутренних итерациях алгоритма SOFGMRES(m)

Докажем сначала несколько вспомогательных утверждений.

Рассмотрим свойства вектора текущей невязки на внутренних итерациях алгоритма SOFGMRES(m). Для этого запишем матричное соотношение

$$AY_{k+i-1} = P_{k+i} H_{k+i-1}$$

на i-той итерации внутреннего цикла алгоритма SOFGMRES(m) в QR-форме

$$AY_{k+i-1} = W_{k+i-1} R_{k+i-1}. \tag{4.1}$$

Утверждение 4.1. *Имеет место следующее соотношение ортогональности*

$$r_{k+i-1} \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1}). \tag{4.2}$$

Доказательство. Пусть $r_{k+i-1} \not\perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1})$. Поскольку W_{k+i-1} является матрицей с ортонормированными столбцами, это означает, что существует представление

$$r_{k+i-1} = r^{I}_{k+i-1} + r^{II}_{k+i-1}, \tag{4.3}$$

где

$$\begin{array}{ll} r^{I}_{k+i-1} \in \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1}), & r^{II}_{k+i-1} \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1}), \\ \| \, r^{I}_{k+i-1} \, \| \neq 0, & r^{I}_{k+i-1} \perp r^{II}_{k+i-1}. \end{array} \tag{4.4}$$

По определению $r_{k+i-1} = b - Ax_{k+i-1}$ для x_{k+i-1}, вычисленного по формуле (3.10). Обозначим

$$\triangle x = Y_{k+i-1} R^{-1}_{k+i-1} W^{T}_{k+i-1} r_{k+i-1}.$$

Для вектора $\widetilde{x}_{k+i-1} = x_{k+i-1} + \triangle x$ имеем

$$\widetilde{r}_{k+i-1} = b - A\widetilde{x}_{k+i-1} = r_{k+i-1} - A\triangle x =$$

$$= r_{k+i-1} - W_{k+i-1} W^{T}_{k+i-1} r_{k+i-1} = r^{II}_{k+i-1}.$$

Но в силу (4.3) и (4.4) получаем, что

$$\|\widetilde{r}_{k+i-1}\| < \|r_{k+i-1}\|,$$

т.е. если $r_{k+i-1} \not\perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1})$, то соответствующий вектор z_{k+i-1} не является решением задачи минимизации (3.8). $\square$

Теперь установим связь между алгоритмами GMRES и SOFGMRES(m) в случае, когда начальные матричные соотношения (2.4) получены с помощью выполнения классических итераций Арнольди.

Утверждение 4.2. *Пусть начальные матричные соотношения (2.4) получены в результате выполнения k итераций алгоритма Арнольди с матрицей A и начальным вектором $b/\|b\|$. Пусть на итерациях внутреннего цикла алгоритма SOFGMRES(m) имеют место неравенства*

$$g_{k+i,k+i} \neq 0, \quad i = 1, \ldots, m. \tag{4.5}$$

Тогда полученные после m итераций внутреннего цикла алгоритма SOFGMRES(m) расширенные матричные соотношения (3.12) являются матричными соотношениями (2.2) алгоритма Арнольди после $k+m$ итераций. При этом $Y_{k+m} = P_{k+m}$.

Доказательство. Достаточно показать, что в условиях утверждения 4.2 имеют место равенства

$$y_i = p_i, \quad i = 1, \ldots, k+m. \tag{4.6}$$

Для первых k индексов равенства (4.6) имеют место по предположению. Для применения индукции предположим, что равенства (4.6) выполнены до индекса $k+i-1$ включительно, $i < m$. Покажем, что если $g_{k+i,k+i} \neq 0$, то имеет место равенство

$$p_{k+i} = y_{k+i}.$$

Имеем соотношения

$$\begin{aligned} AY_{k+i-1} &= P_{k+i}H_{k+i-1}, \\ P_{k+i} &= [Y_{k+i-1}, p_{k+i}], \\ P_{k+i}^T P_{k+i} &= I_{k+i}. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Вычисляя y_{k+i}, имеем (см. формулы (3.11) и (4.7)):

$$r_{k+i-1} = P_{k+i}t_{k+i-1} \equiv Y_{k+i-1}t_{k+i-1}^I + p_{k+i}t_{k+i-1}^{II},$$

где

$$t_{k+i-1} = \begin{bmatrix} t_{k+i-1}^I \\ t_{k+i-1}^{II} \end{bmatrix}, \; t_{k+i-1}^I \in \mathbb{R}^{k+i-1}.$$

С другой стороны, согласно формуле (3.3) получаем

$$r_{k+i-1} = Y_{k+i-1} \begin{bmatrix} g_{1,k+i} \\ \vdots \\ g_{k+i-1,k+i} \end{bmatrix} + y_{k+i}g_{k+i,k+i}.$$

Вектор y_{k+i} ортогонален $\mathrm{Span}\,(Y_{k+i-1})$ по определению, вектор p_{k+i} ортогонален $\mathrm{Span}\,(Y_{k+i-1})$ по предположению индукции, поэтому

$$t^{I}_{k+i-1} = \begin{bmatrix} g_{1,k+i} \\ \vdots \\ g_{k+i-1,k+i} \end{bmatrix},$$

следовательно,

$$p_{k+i}t^{II}_{k+i-1} = y_{k+i}g_{k+i,k+i}.$$

Но $\|p_{k+i}\| = \|y_{k+i}\| = 1$ и $g_{k+i,k+i} \neq 0$, поэтому векторы p_{k+i} и y_{k+i} коллинеарны, а значит поменяв при необходимости знак скалярного множителя $g_{k+i,k+i}$ всегда можно добиться выполнения равенства

$$p_{k+i} = y_{k+i}.$$

□

Итак, если выполнены условия утверждения 4.2, то расширенные матричные соотношения (3.12) алгоритма SOFGMRES(m) совпадают с матричными соотношениями алгоритма Арнольди после $k+m$ итераций. Если фильтрация расширенных матричных соотношений отсутствует (т.е. $l = m$, $U_l = I_m$) и если на последующих итерациях внутреннего цикла вновь выполнены условия (4.5), то начальные, расширенные и отфильтрованные матричные соотношения алгоритма SOFGMRES(m) можно рассматривать как матричные соотношения алгоритма Арнольди. Это означает, что при выполнении всех упомянутых выше условий алгоритмы GMRES и SOFGMRES(m) математически эквивалентны.

Условие (4.5) утверждения 4.2 является существенным и в общем случае, когда в начальных матричных соотношениях равенство $Y_k = P_k$ не имеет места. Действительно, если условие (4.5) не выполнено, то новый вектор направления y_{k+i} не определен однозначно, его конкретный выбор может определяться ошибками округления. При этом после текущей внутренней итерации может оказаться, что выбранный вектор направления настолько "плох", что новая невязка совпадает с предыдущей, и т.д.

Итак, если $g_{k+i,k+i} = 0$ на некоторой внутренней итерации алгоритма SOFGMRES(m), то в алгоритме возможно зацикливание. Необходимо подчеркнуть, что теоретическая возможность зацикливания является отличительной особенностью алгоритма SOFGMRES(m) и связана только с тем, что новый вектор направления вычисляется через QR разложение матрицы, составленной из векторов невязок.

Замечание 4.1. На практике при выполнении численных экспериментов авторы никогда не сталкивались с подобной ситуацией. Однако для завершения теоретического анализа ниже мы рассматриваем возможную процедуру устранения зацикливания.

Определение 4.1. *Если $g_{k+i,k+i} = 0$ на i-той внутренней итерации, то мы будем говорить, что произошел обрыв (breakdown) итераций.*

Имеет место следующая характеризация обрыва на внутренних итерациях в алгоритме SOFGMRES(m).

Утверждение 4.3. *Если*

$$(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1}) \neq 0,$$

то обрыв на i-той итерации внутреннего цикла невозможен, т.е.

$$g_{k+i,k+i} \neq 0. \tag{4.8}$$

Более того, если на i-той итерации внутреннего цикла произошел обрыв, то

$$(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1}) = 0.$$

Доказательство. Из утверждения 4.1 следует, что $r_{k+i-1} \perp \operatorname{Span}(W_{k+i-1})$. Из равенства (4.1) получаем

$$(AY_{k+i-1})^T r_{k+i-1} = R_{k+i-1}^T W_{k+i-1}^T r_{k+i-1} = 0.$$

Пусть имеет место неравенство $(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1}) \neq 0$. Но

$$r_{k+i-1} = Y_{k+i-1} \begin{bmatrix} g_{1,k+i} \\ \vdots \\ g_{k+i-1,k+i} \end{bmatrix} + y_{k+i} g_{k+i,k+i}.$$

Если здесь $g_{k+i,k+i} = 0$, то

$$(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1}) = \left(\begin{bmatrix} g_{1,k+i} \\ \vdots \\ g_{k+i-1,k+i} \end{bmatrix}, \ (AY_{k+i-1})^T r_{k+i-1} \right) = 0,$$

т.е., имеет место противоречие. С помощью аналогичных рассуждений легко получаем вторую часть утверждения 4.3. □

Утверждение 4.3 позволяет сформулировать достаточные условия на матрицу коэффициентов A и текущее подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_{k+i-1})$, при выполнении которых обрыв теоретически невозможен.

Следствие 4.1. *Пусть имеет место хотя бы одно из двух неравенств:*

$$\lambda_{\min}\left(\frac{A+A^T}{2}\right) > 0 \tag{4.9}$$

или

$$\lambda_{\max}\left(\frac{A+A^T}{2}\right) < 0, \tag{4.10}$$

т.е. симметричная часть матрицы A является знакоопределенной. Тогда до тех пор, пока $r_{k+i-1} \neq 0$, обрыв в алгоритме SOFGMRES(m) невозможен.

Доказательство. Пусть $r_{k+i-1} \neq 0$, т.е., полная сходимость не достигнута. Имеет место тождество

$$(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1}) = \left(\left(\frac{A+A^T}{2}\right) r_{k+i-1}, r_{k+i-1}\right).$$

Если теперь выполнено хотя бы одно (на самом деле не более, чем одно) условие следствия 4.1, то выполнено условие утверждения 4.3, гарантирующее отсутствие обрыва. □

Следствие 4.2. *Если для любого ненулевого вектора w такого, что $w \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i_*-1})$, $1 \le i_* \le m$, имеет место неравенство*

$$(Aw, w) > 0,$$

то начиная с итерации с номером i_* и до тех пор, пока $r_{k+i-1} \neq 0$, обрыв в алгоритме SOFGMRES(m) невозможен.

Если для любого ненулевого вектора w такого, что $w \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i_*-1})$, $1 \le i_* \le m$, имеет место неравенство

$$(Aw, w) < 0,$$

то начиная с итерации с номером i_* и до тех пор, пока $r_{k+i-1} \neq 0$, обрыв в алгоритме SOFGMRES(m) невозможен.

Доказательство. Докажем первую часть следствия 4.2, вторая часть доказывается аналогично.

Из утверждения 4.1 следует, что $r_{k+i-1} \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1})$. Если $r_{k+i-1} \neq 0$ и $i \geq i_*$, то $r_{k+i-1} \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i_*-1})$, поэтому, по условию следствия 4.2,

$$(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1}) > 0.$$

□

Поскольку в алгоритме SOFGMRES(m) необходимо на **Step** 5 и 7 ортогонализовать столбцы двух матриц P_k и Y_k, представляется важным исследовать смысл равенства $h_{k+i+1,k+i+1} = 0$ из второго процесса ортогонализации, аналогичного равенству $g_{k+i,k+i} = 0$ из первого процесса ортогонализации.

Утверждение 4.4. *Пусть имеет место равенство*

$$h_{k+i+1,k+i+1} = 0. \tag{4.11}$$

Тогда вектор x_{k+i}, полученный на следующей итерации внутреннего цикла алгоритма SOFGMRES(m), есть решение.

Доказательство. Из условия (4.11) следует равенство

$$AY_{k+i} = P_{k+i}\bar{H}_{k+i}, \tag{4.12}$$

где матрица $\bar{H}_{k+i}$ получена из H_{k+i} отбрасыванием последней нулевой строки. Матрицы Y_{k+i} и P_{k+i} – матрицы с ортонормированными столбцами, матрица A невырождена. Поэтому, аналогично доказательству утверждения 2.1 и следствия 2.1, можно показать, что $\bar{H}_{k+i}$ – невырожденная квадратная матрица. С другой стороны, по формуле (3.11)

$$r_{k+i-1} = P_{k+i}t_{k+i-1}.$$

Поэтому для вектора

$$\widetilde{x}_{k+i} = Y_{k+i}(\bar{H}_{k+i})^{-1}t_{k+i-1}$$

имеет место равенство

$$A\widetilde{x}_{k+i} = P_{k+i}t_{k+i-1} = r_{k+i-1},$$

т.е. полная сходимость достигнута. □

Из утверждения 4.4 следует, что на внутренних итерациях обрыв во втором процессе ортогонализации алгоритма SOFGMRES(m) невозможен. Равенство нулю соответствующего коэффициента просто означает, что полная сходимость достигнута, и итерационный процесс в алгоритме SOFGMRES(m) надо остановить.

Хотя обрыв внутренних итераций и маловероятен, возникает вопрос о том, что можно предпринять, если обрыв все таки имеет место. В этом случае необходимо провести некоторые другие вычисления, которые изменят вектор невязки таким образом, чтобы равенство $(Ar_{k+i}, r_{k+i}) = 0$ на следующей итерации уже не имело бы места; после этого можно вернуться к проведению внутренних итераций алгоритма SOFGMRES(m) в том виде, как это было описано в предыдущем разделе. Эту процедуру будем называть *устранением обрыва* в алгоритме SOFGMRES(m).

Одним из простейших способов устранения обрыва является использование в вычислениях операции умножения на матрицу A^T. Опишем это подробнее.

Пусть на i-той итерации произошел обрыв, т.е. $g_{k+i,k+i} = 0$. Вычисляем

$$\widetilde{r}_{k+i-1} = A^T r_{k+i-1}. \tag{4.13}$$

Предполагая, что $r_{k+i-1} \neq 0$ получим $\widetilde{r}_{k+i-1} \neq 0$ в силу невырожденности A, или

$$\|\widetilde{r}_{k+i-1}\| \neq 0. \tag{4.14}$$

Вместо (3.3) найдем новый вектор направления y_{k+i} из соотношения

$$\widetilde{r}_{k+i-1} = [Y_{k+i-1}, y_{k+i}] \begin{bmatrix} \widetilde{g}_{1,k+i} \\ \vdots \\ \widetilde{g}_{k+i,k+i} \end{bmatrix}, \tag{4.15}$$

т.е., в QR разложение (3.2) вместо вектора невязки r_{k+i-1} подставляется вектор $\widetilde{r}_{k+i-1}$.

Утверждение 4.5. *Если $r_{k+i-1} \neq 0$, то*

$$\widetilde{g}_{k+i,k+i} \neq 0. \tag{4.16}$$

Более того, для невязки r_{k+i} на следующей итерации имеет место соотношение

$$r_{k+i} \neq r_{k+i-1}. \tag{4.17}$$

Доказательство. Докажем неравенство (4.16). Если $\widetilde{g}_{k+i,k+i} = 0$, то

$$\widetilde{r}_{k+i-1} = Y_{k+i-1} \begin{bmatrix} \widetilde{g}_{1,k+i} \\ \vdots \\ \widetilde{g}_{k+i-1,k+i} \end{bmatrix}. \tag{4.18}$$

Из соотношений (4.14) и (4.18) получаем

$$0 \neq (\widetilde{r}_{k+i-1}, \widetilde{r}_{k+i-1}) = (r_{k+i-1}, A\widetilde{r}_{k+i-1}) =$$

$$= \left(r_{k+i-1}, AY_{k+i-1} \begin{bmatrix} \widetilde{g}_{1,k+i} \\ \vdots \\ \widetilde{g}_{k+i-1,k+i} \end{bmatrix} \right) = 0,$$

последнее равенство верно в силу ортогональности $r_{k+i-1} \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1})$. Получили противоречие. Поэтому $\widetilde{g}_{k+i,k+i} \neq 0$. Это означает, в частности, что для текущего r_{k+i-1} вектор направления y_{k+i} по формуле (4.15) определяется однозначно с точностью до скалярного множителя. Докажем, что для построенного по формуле (4.15) вектора направления y_{k+i} имеет место (4.17). Для этого достаточно показать, что $(Ay_{k+i}, r_{k+i-1}) \neq 0$. Но

$$(Ay_{k+i}, r_{k+i-1}) = (y_{k+i}, \widetilde{r}_{k+i-1}) = \widetilde{g}_{k+i,k+i} \neq 0.$$

□

Итак, если вектор направления y_{k+i} вычисляется по формулам (4.13) и (4.15), то с точностью до скалярного множителя он определен однозначно и имеет место неравенство (4.17).

Теоретически возможна ситуация, когда для нового вектора невязки r_{k+i} снова имеет место равенство $(Ar_{k+i}, r_{k+i}) = 0$, т.е., снова возможен обрыв. Иными словами описанная выше процедура может устранить обрыв, но не гарантирует то, что обрыв впоследствии не произойдет.

Теперь мы можем доказать следующую оценку монотонного падения нормы невязки на внутренних итерациях алгоритма SOFGMRES(m).

Теорема 4.1. *Для любой невырожденной матрицы A имеет место неравенство:*

$$\|r_{k+i}\| \leq \|r_{k+i-1}\| \sqrt{1 - \theta_{k+i-1}^2 \psi_{k+i-1}^2}\,, \tag{4.19}$$

где

$$\begin{aligned} \theta_{k+i-1} &= \frac{|(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1})|}{||r_{k+i-1}||^2}, \\ \psi_{k+i-1} &= ||\{R_{k+i}\}_{*,k+i}||^{-1}, \end{aligned} \tag{4.20}$$

причем

$$\theta_{k+i-1}\psi_{k+i-1} \le 1. \tag{4.21}$$

Доказательство. В случае, когда имеет место обрыв неравенство (4.19) переходит, в силу $\theta_{k+i-1} = 0$, в очевидное неравенство

$$||r_{k+i}|| \le ||r_{k+i-1}||.$$

Поэтому, когда имеет место обрыв в алгоритме SOFGMRES(m), неравенства (4.19) и (4.21) выполнены.

Рассмотрим теперь случай, когда обрыв отсутствует. Из утверждения 4.1 следуют соотношения

$$\begin{array}{ccc} r_{k+i-1} & \perp & \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1}), \\ r_{k+i} & \perp & \mathrm{Span}\,(W_{k+i}). \end{array} \tag{4.22}$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} r_{k+i-1} &= b - Ax_{k+i-1} = b - AY_{k+i-1}z_{k+i-1} = \\ &= b - W_{k+i-1}R_{k+i-1}z_{k+i-1} = b - W_{k+i-1}\widetilde{z}_{k+i-1}, \end{aligned} \tag{4.23}$$

где

$$\widetilde{z}_{k+i-1} = R_{k+i-1}z_{k+i-1}.$$

Аналогично

$$r_{k+i} = b - W_{k+i}\widetilde{z}_{k+i}. \tag{4.24}$$

Принимая во внимание равенство

$$W_{k+i} = [W_{k+i-1}, w_{k+i}], \tag{4.25}$$

и учитывая, что W_{k+i} является матрицей с ортонормированными столбцами, из соотношений (4.22), (4.23) и (4.24) получаем равенство

$$r_{k+i} = r_{k+i-1} - w_{k+i}w_{k+i}^T r_{k+i-1}. \tag{4.26}$$

По теореме Пифагора

$$||r_{k+i-1}||^2 = ||r_{k+i}||^2 + |w_{k+i}^T r_{k+i-1}|^2. \tag{4.27}$$

Оценим снизу $|w_{k+i}^T r_{k+i-1}|$. Для этого заметим, что

$$\{R_{k+i}\}_{k+i,k+i} \neq 0$$

как диагональный элемент невырожденной треугольной матрицы. Далее, выразим вектор w_{k+i} из соотношения $Ay_{k+i} = W_{k+i}\{R_{k+i}\}_{*,k+i}$, получим формулу

$$w_{k+i} = \frac{Ay_{k+i} - \sum\limits_{j=1}^{k+i-1} w_j \,\{R_{k+i}\}_{j,k+i}}{\{R_{k+i}\}_{k+i,k+i}}.$$

Учитывая ортогональность вектора невязки r_{k+i-1} векторам w_j, $j = 1, \ldots, k+i-1$, получим неравенства

$$|w_{k+i}^T r_{k+i-1}| = \frac{|(Ay_{k+i}, r_{k+i-1})|}{|\{R_{k+i}\}_{k+i,k+i}|} \geq |(Ay_{k+i}, r_{k+i-1})| \;\psi_{k+i-1}. \quad (4.28)$$

Поскольку по предположению обрыв отсутствует, имеем неравенство

$$g_{k+i,k+i} \neq 0.$$

Выразим из равенства (3.3) вектор y_{k+i} через r_{k+i-1}:

$$y_{k+i} = \frac{r_{k+i-1} - Y_{k+i-1} \begin{bmatrix} g_{1,k+i} \\ \vdots \\ g_{k+i-1,k+i} \end{bmatrix}}{g_{k+i,k+i}}.$$

Учитывая соотношения

$$|g_{k+i,k+i}| \leq \|r_{k+i-1}\|$$

и

$$(AY_{k+i-1})^T r_{k+i-1} = R_{k+i-1}^T W_{k+i-1}^T r_{k+i-1} = 0$$

получаем, что

$$|(Ay_{k+i}, r_{k+i-1})| = \frac{|(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1})|}{|g_{k+i,k+i}|} \geq$$

$$\geq \frac{|(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1})|}{\|r_{k+i-1}\|} = \theta_{k+i-1}\|r_{k+i-1}\|,$$

т.е.,

$$|w_{k+i}^T r_{k+i-1}| \geq \theta_{k+i-1} \psi_{k+i-1} ||r_{k+i-1}||. \tag{4.29}$$

Подставляя (4.29) в (4.27), получаем неравенство (4.19) теоремы.

Неравенство (4.21) также следует из соотношений (4.27) и (4.29), поскольку если имеет место неравенство

$$\theta_{k+i-1} \psi_{k+i-1} > 1,$$

то из (4.27) и (4.29) следует неравенство

$$||r_{k+i}|| < 0,$$

чего быть не может. □

Утверждение теоремы 4.1 представляет собой пошаговую оценку скорости сходимости через предыдущую невязку. Из этого утверждения, в частности, следует, что если на текущей внутренней итерации $(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1}) \neq 0$, т.е., обрыв заведомо отсутствует, то норма невязки строго убывает.

4.2. Спектральная/сингулярная характеризация начальных матричных соотношений и оценка скорости сходимости внутренних итераций алгоритма SOFGMRES(m)

Полученная оценка теоремы 4.1 по сути не может быть использована для оптимизации скорости сходимости и построения эффективных процедур фильтрации расширенных матричных соотношений. Однако замечательные свойства QR формы матричных соотношений позволяют получить из нее оценку скорости сходимости алгоритма SOFGMRES(m) в терминах спектральной/сингулярной характеризации начальных матричных соотношений. Для этого введем сначала некоторые обозначения.

Пусть Y_k – матрица с ортонормированными столбцами, W_k – матрица с ортонормированными столбцами из равенства (2.8) и $k < N$. Обозначим

$$\Theta_A(Y_k) = \min_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W_k) \\ ||w|| \neq 0}} \frac{|(Aw, w)|}{||w||^2}, \tag{4.30}$$

$$\Psi_A^{-1}(Y_k) = \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(Y_k) \\ ||y|| \neq 0}} \frac{||Ay||}{||y||}. \tag{4.31}$$

В силу условия $k < N$ множества ненулевых векторов $w \perp \mathrm{Span}\,(W_k)$ и $y \perp \mathrm{Span}\,(Y_k)$ непусты, поэтому в силу невырожденности матрицы A, однородности функций $\dfrac{|(Aw,w)|}{||w||^2}$ и $\dfrac{||Ay||}{||y||}$ и непрерывности функций $|(Aw,w)|$ и $||Ay||$ величины $\Theta_A(Y_k)$ и $\Psi_A(Y_k)$ определены, конечны и достижимы на соответствующих векторах w_* и y_* соответственно.

Утверждение 4.6. *Функции Θ_A и Ψ_A являются монотонными функциями подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$, а именно, если $k+i-1 < N$, то имеют место соотношения*

$$\Theta_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]) \geq \Theta_A(Y_k),$$

$$\Psi_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]) \geq \Psi_A(Y_k),$$

где $y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}$ – некоторые векторы направления такие, что $[Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]$ является матрицей с ортонормированными столбцами.

Доказательство. Утверждение следует из включений

$$\mathrm{Span}\,(W_{k+i-1}^{\perp}) \subset \mathrm{Span}\,(W_k^{\perp})$$

и

$$\mathrm{Span}\,(Y_{k+i-1}^{\perp}) \subset \mathrm{Span}\,(Y_k^{\perp})$$

и из определений функций min и max по заданному непустому множеству. $\square$

Обозначим

$$\mu_A(Y_k) = \Theta_A(Y_k)\Psi_A(Y_k). \tag{4.32}$$

Утверждение 4.7. *Имеют место неравенства*

$$0 \;\leq\; \mu_A(Y_k) \;\leq\; 1.$$

Доказательство. Левое неравенство утверждения 4.7 следует из определения $\mu_A(Y_k)$. Докажем правое неравенство.

Пусть $Y_k^{\perp}$ и $W_k^{\perp}$ – дополнения Y_k и W_k соответственно до ортонормированных базисов в $\mathbb{R}^N$. В силу условия $k < N$ выполнены неравенства $\dim(\mathrm{Span}\,(Y_k^{\perp})) \neq 0$ и $\dim(\mathrm{Span}\,(W_k^{\perp})) \neq 0$. Для некоторых матриц R_k^I и R_k^{II} соответствующих размерностей имеет место равенство

$$A\left[Y_k, Y_k^{\perp}\right] = \left[W_k, W_k^{\perp}\right] \begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}. \tag{4.33}$$

Имеем соотношения

$$\Psi_A^{-1}(Y_k) = \max_{\substack{y \perp \mathrm{Span}\,(Y_k) \\ ||y|| \neq 0}} \frac{||Ay||}{||y||} = \max_{||\phi|| \neq 0} \frac{||AY_k^{\perp}\phi||}{||Y_k^{\perp}\phi||} = \left\| \begin{bmatrix} R_k^I \\ R_k^{II} \end{bmatrix} \right\|,$$

т.е.,

$$\Psi_A(Y_k) = \left\| \begin{bmatrix} R_k^I \\ R_k^{II} \end{bmatrix} \right\|^{-1}. \qquad (4.34)$$

В силу ортогональности матриц $[Y_k, Y_k^{\perp}]$ и $[W_k, W_k^{\perp}]$ равенство (4.33) можно переписать в виде

$$A^T\,[W_k, W_k^{\perp}] = [Y_k, Y_k^{\perp}] \begin{bmatrix} R_k^T & 0 \\ (R_k^I)^T & (R_k^{II})^T \end{bmatrix}. \qquad (4.35)$$

Теперь

$$\Theta_A(Y_k) = \min_{\substack{w \perp \mathrm{Span}\,(W_k) \\ ||w|| \neq 0}} \frac{|(Aw, w)|}{||w||^2} = \min_{||\phi|| \neq 0} \frac{|(AW_k^{\perp}\phi, W_k^{\perp}\phi)|}{||W_k^{\perp}\phi||^2} =$$

$$= \min_{||\phi|| \neq 0} \frac{|(W_k^{\perp}\phi, A^T W_k^{\perp}\phi)|}{||\phi||^2} = \min_{||\phi|| \neq 0} \frac{|(W_k^{\perp}\phi, Y_k^{\perp}(R_k^{II})^T\phi)|}{||\phi||^2} \leq ||R_k^{II}||,$$

т.е.,

$$\Theta_A(Y_k) \leq ||R_k^{II}||. \qquad (4.36)$$

Объединяя (4.34) и (4.36) получаем требуемое утверждение. $\square$

Замечание 4.2. Нетрудно показать (см. также Раздел 5), что функция Θ_A из определения (4.30) равна либо 0, либо модулю младшего по абсолютной величине значения Ритца симметричной части матрицы A на подпространстве, ортогональном к $\mathrm{Span}\,(W_k)$. Аналогично, функция Ψ_A из определения (4.31) может быть вычислена как число, обратное к старшему сингулярному значению матрицы A на подпространстве, ортогональном к $\mathrm{Span}\,(Y_k)$. Поэтому функция μ_A из определения (4.32) представляет собой некоторую монотонную спектральную/сингулярную характеристику подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$, которая, в силу неравенств утверждения 4.7, может рассматриваться как некоторое “обобщенное обратное число обусловленности” матрицы A на подпространстве, ортогональном в смысле определений (4.30) и (4.31) к $\mathrm{Span}\,(Y_k)$. Термин "обобщенное обратное число обусловленности" здесь уместен, поскольку если подпространство $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ пусто, а матрица A симметрична и положительно определена, то μ_A есть обратное число обусловленности матрицы A в обычном смысле.

Теперь мы можем оценить величины θ_{k+i-1} и ψ_{k+i-1} из теоремы 4.1 в терминах функций $\Theta_A(Y_k)$, $\Psi_A(Y_k)$ и $\mu_A(Y_k)$.

Теорема 4.2. *Пусть* $r_{k+i-1} \neq 0$ *и* $k+i-1 < N$. *Имеют место неравенства*

$$\theta_{k+i-1} \geq \Theta_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]) \geq \Theta_A(Y_k),$$

$$\psi_{k+i-1} \geq \Psi_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]) \geq \Psi_A(Y_k),$$

$$\theta_{k+i-1}\psi_{k+i-1} \geq \mu_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]) \geq \mu_A(Y_k),$$

$$\|r_{k+i}\| \leq \|r_{k+i-1}\|\sqrt{1-\mu_A^2([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}])} \leq$$

$$\leq \|r_{k+i-1}\|\sqrt{1-\mu_A^2(Y_k)}. \tag{4.37}$$

Доказательство. По определению,

$$\theta_{k+i-1} = \frac{|(Ar_{k+i-1}, r_{k+i-1})|}{\|r_{k+i-1}\|^2},$$

но имеет место условие ортогональности $r_{k+i-1} \perp \mathrm{Span}\,(W_{k+i-1})$, и поэтому

$$\theta_{k+i-1} \geq \Theta_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]).$$

Далее,

$$\psi_{k+i-1} = \|\{R_{k+i}\}_{*,k+i}\|^{-1} = \|W_{k+i}\{R_{k+i}\}_{*,k+i}\|^{-1} =$$

$$= \|Ay_{k+i}\|^{-1} = \frac{\|y_{k+i}\|}{\|Ay_{k+i}\|} \geq \Psi_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}]).$$

Остальные неравенства теоремы непосредственно следуют из утверждения 4.6, из определения μ_A и из оценки теоремы 4.1. □

Оценка (4.37) теоремы 4.2 показывает, что скоростью сходимости внутренних итераций алгоритма SOFGMRES(m) можно управлять при помощи выбора начального подпространства

$\mathrm{Span}(Y_k)$. При этом, чем ближе $\mu_A(Y_k)$ к 1, тем выше скорость сходимости. В смысле величины $\mu_A(Y_k)$ выбор начального подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ в алгоритме SOFGMRES(m) можно рассматривать как выбор некоторого "переобуславливателя", ускоряющего сходимость и обладающего замечательным свойством монотонности. Заметим также, что при неудачном выборе Y_k в случае незнакоопределенной A величина $\Theta_A(Y_k)$ может оказаться нулевой, поэтому имеет смысл всегда рассматривать конечную величину $\mu_A(Y_k)$, а не обратную к ней, которая в этом случае может принимать в том числе и бесконечные значения.

Из оценки (4.36) следует также, что как только $\mu_A(Y_k) > 0$ для начального Y_k, то на последующих внутренних итерациях алгоритма SOFGMRES(m) гарантируется как минимум линейная сходимость. Более того, оценка (4.37) также описывает суперлинейную сходимость алгоритма SOFGMRES(m). Это следует из того факта, что характеристика $\mu_A([Y_k, y_{k+1}, \ldots, y_{k+i-1}])$ не убывает при расширении подпространства, и, в соответствии с (4.37), ее скачкообразное увеличение при добавлении текущего вектора направления гарантирует более быструю сходимость на последующих внутренних итерациях.

5. Фильтрация расширенных матричных соотношений

Как уже отмечалось выше, основная идея алгоритма SOFGMRES(m) состоит в том, чтобы организовать фильтрацию расширенных матричных соотношений (3.12) таким образом, чтобы от рестарта к рестарту в начальных матричных соотношениях одновременно эффективно накапливалась информация об уточненном приближении к решению, а также некоторая спектральная/сингулярная информация, позволяющая поддерживать высокую скорость сходимости, сравнимую со скоростью сходимости алгоритма GMRES без рестартов. Иными словами, необходимо оставлять в Y_k только те направления, которые позволяют сохранить высокую скорость сходимости внутренних итераций, измеряемую в терминах оценки скорости сходимости из теоремы 4.2.

Пусть после m внутренних итераций алгоритма SOFGMRES(m) построены расширенные матричные соотношения (3.12). Опишем сначала алгебраическую процедуру сохранения части направлений из Y_{k+m} при рестарте.

Пусть выбрано целое число l, $1 \le l \le m$, и матрица с l ортонормированными столбцами U_l, $U_l \in \mathbb{R}^{m\times l}$, $U_l^T U_l = I_l$. Вычисляем

$$[y_{k+1}, \dots, y_{k+m}]\ U_l = [\widetilde{y}_{k+1}, \dots, \widetilde{y}_{k+l}]. \tag{5.1}$$

Легко видеть, что для построенных таким образом векторов $\widetilde{y}_{k+j}$, $j = 1, \dots, l$, имеют место соотношения ортогональности

$$Y_k^T \widetilde{y}_{k+j} = 0, \quad j = 1, \dots, l.$$

Более того, если обозначить

$$\widetilde{Y}_{k+l} = [Y_k, \widetilde{y}_{k+1}, \dots \widetilde{y}_{k+l}], \tag{5.2}$$

то имеет место равенство

$$\widetilde{Y}_{k+l}^T \widetilde{Y}_{k+l} = I_{k+l}. \tag{5.3}$$

Достроим текущие начальные матричные соотношения (2.4) до матричных соотношений

$$\begin{cases} A\widetilde{Y}_{k+l} = \widetilde{P}_{k+l+1} \widetilde{H}_{k+l}, \\ \widetilde{Y}_{k+l}^T \widetilde{Y}_{k+l} = I_{k+l}, \\ \widetilde{P}_{k+l+1}^T \widetilde{P}_{k+l+1} = I_{k+l+1}, \\ b = \widetilde{P}_{k+l+1} \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}, \end{cases} \tag{5.4}$$

с матрицей $\widetilde{Y}_{k+l}$, здесь $\widetilde{Y}_{k+l} \in \mathbb{R}^{N\times(k+l)}$, $\widetilde{P}_{k+l+1} \in \mathbb{R}^{N\times(k+l+1)}$, $\widetilde{H}_{k+l} \in \mathbb{R}^{(k+l+1)\times(k+l)}$ – верхняя хессенбергова и $\begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{k+l+1}$. Для этого, в том числе, необходимо вычислить векторы $A\widetilde{y}_{k+j}$, $j = 1, \dots, l$. Существует два способа вычисления этих векторов:

(А) явное умножение $\widetilde{y}_{k+j}$ на A, $j = 1, \dots, l$;

(Б) вычисление векторов $A\widetilde{y}_{k+j}$ исходя из неотфильтрованных соотношений (3.12) без новых умножений на матрицу A.

На практике выбор конкретного способа будет зависеть от величины затрат на умножение на матрицу A. Первый способ очевиден, поэтому в этой работе мы подробно рассмотрим только второй способ.

По построению имеют место равенства

$$\widetilde{y}_{k+j} = [y_{k+1}, \dots, y_{k+m}]\ \{U_l\}_{*,j},\ j = 1, \dots, l.$$

Но из соотношений (3.12) следует, что

$$Ay_{k+i} = P_{k+m+1}\{H_{k+m}\}_{*,k+i}, \quad i = 1, \ldots, m,$$

поэтому

$$A\widetilde{y}_{k+j} = A[y_{k+1}, \ldots, y_{k+m}]\{U_l\}_{*,j} =$$

$$= P_{k+m+1}[\{H_{k+m}\}_{*,k+1}, \ldots, \{H_{k+m}\}_{*,k+m}]\{U_l\}_{*,j} = P_{k+m+1}\widetilde{h}_j,$$

где введены обозначения

$$\widetilde{h}_j = [\{H_{k+m}\}_{*,k+1}, \ldots, \{H_{k+m}\}_{*,k+m}]\{U_l\}_{*,j}, \quad j = 1, \ldots, l.$$

Использование описанного выше способа вычисления векторов $A\widetilde{y}_{k+j}$, $j = 1, \ldots, l$, исходя из неотфильтрованных соотношений (3.12) без новых умножений на матрицу A, позволяет рассматривать затраты на фильтрацию расширенных матричных соотношений как чисто схемные (т.е., полные затраты итерационного этапа вычислений за исключением затрат на умножение на матрицу A) затраты алгоритма SOFGMRES(m). Более того, во многих случаях, например, когда в матрице коэффициентов и в переобуславливателе достаточно много элементов в строке, при таком способе вычисления векторов $A\widetilde{y}_{k+j}$, $j = 1, \ldots, l$, соответствующие арифметические затраты могут быть значительно меньше, чем в случае явных умножений на (переобусловленную) матрицу коэффициентов.

Конкретный выбор числа l и матрицы с ортонормированными столбцами U_l зависит от тех целей, которые ставятся при сохранении части информации при рестарте. Однако в любом случае представляется необходимым:

(1) обеспечить монотонность падения нормы невязки при рестартах; соответствующий выбор числа l и матрицы U_l описан в Разделе 5.1;

(2) добиться максимального сохранения свойств сходимости алгоритма SOFGMRES(m) при рестарте. В большинстве случаев для (переобусловленной) матрицы A можно ожидать, что имеет место кластеризация вокруг 1 большей части собственных чисел симметричной части матрицы A, а также кластеризация вокруг 1 большей части сингулярных чисел матрицы A. Это значит, что для максимального сохранения свойств сходимости алгоритма при рестартах в

отфильтрованных матричных соотношениях надо оставить информацию об отрицательных собственных значениях и близких к нулю отделенных младших собственных значениях симметричной части матрицы, а также информацию об отделенных старших сингулярных значениях матрицы; подходящие для этой цели процедуры фильтрации описаны ниже в Разделе 5.2;

(3) предложить способ составления из нескольких матриц U_l с ортонормированными столбцами одной фильтрующей матрицы с ортонормированными столбцами для того, чтобы обеспечить одновременно и монотонность падения нормы невязки при рестартах, и сохранение спектральной/сингулярной информации для поддержания высокой скорости сходимости; процедура фильтрации в этом случае описана в Разделе 5.3;

(4) поскольку параметр m необходимо выбирать небольшим, имеет смысл предусмотреть возможность так называемой двойной фильтрации, когда после нескольких рестартов производится постфильтрация части сохраненных в Y_k направлений; подобный способ фильтрации описан в Разделе 5.4.

5.1. Обеспечение монотонности падения нормы невязки при рестартах

Пусть z_{k+m} является решением локальной задачи минимизации (3.8), полученным после окончания текущего цикла внутренних итераций алгоритма SOFGMRES(m). Выбираем $l = 1$,

$$u = \begin{bmatrix} \{z_{k+m}\}_{k+1} \\ \vdots \\ \{z_{k+m}\}_{k+m} \end{bmatrix}, \quad U_1 = \frac{u}{||u||}. \tag{5.5}$$

Тогда

$$x_{k+m} = Y_{k+m} z_{k+m} = \widetilde{Y}_{k+l} \begin{bmatrix} \{z_{k+m}\}_1 \\ \vdots \\ \{z_{k+m}\}_k \\ ||u|| \end{bmatrix},$$

поэтому текущее приближение к решению x_{k+m} содержится в $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}_{k+l})$. Это гарантирует монотонность падения нормы невязки при рестарте алгоритма SOFGMRES(m) потому, например, что на последующих внутренних итерациях SOFGMRES(m) даже без дополнительной оптимизации для вектора

$$\widetilde{x}_{k+l+i} = \widetilde{Y}_{k+l+i} \begin{bmatrix} \{z_{k+m}\}_1 \\ \vdots \\ \{z_{k+m}\}_k \\ ||u|| \\ 0 \end{bmatrix}$$

норма соответствующего вектора невязки $\widetilde{r}_{k+l+i} = b - A\widetilde{x}_{k+l+i}$ уже равна норме невязки непосредственно перед рестартом.

Заметим также, что вектор u из (5.5) содержит только m последних компонент вектора z_{k+m}, остальные компоненты вектора z_{k+m} не участвуют в вычислениях, связанных с обеспечением монотонности невязки при рестартах. Вектор z_{k+m} есть решение системы

$$R_{k+m} z_{k+m} = d_{k+m}$$

с верхней треугольной матрицей R_{k+m}. Поэтому для вычисления последних m компонент вектора z_{k+m} достаточно использовать только последние m строк верхней треугольной матрицы R_{k+m}. Здесь вектор d_{k+m} состоит из первых $k+m$ компонент вектора $Q^T_{k+m} \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}$.

5.2. Частичное сохранение спектральной/сингулярной информации при рестарте

Посмотрим теперь, какие направления из соотношений (3.12) необходимо оставить для того, чтобы фильтрация не приводила к значительной потере скорости сходимости на последующих внутренних итерациях алгоритма SOFGMRES(m). В соответствии с теорией сходимости, изложенной в Разделе 4, для этого необходимо, чтобы имело место приближенное равенство

$$\mu_A(Y_{k+m}) \approx \mu_A(\widetilde{Y}_{k+l}).$$

Поиск оптимальной матрицы U_l для обеспечения этого приближенного равенства является слишком сложной задачей. Вместо этого мы будем искать квазиоптимальную матрицу U_l. Для этого, учитывая определение (4.32) величины μ_A, будем раздельно добиваться выполнения двух приближенных равенств

$$\Theta_A(Y_{k+m}) \approx \Theta_A(\widetilde{Y}_{k+l}) \tag{5.6}$$

и

$$\Psi_A(Y_{k+m}) \approx \Psi_A(\widetilde{Y}_{k+l}). \tag{5.7}$$

Алгебраический смысл приближенного равенства (5.6) в силу определения (4.30) состоит в сохранении в отфильтрованном подпространстве направлений, отвечающих всем неположительным и части близких к нулю выделенных положительных собственных значений симметричной части матрицы. Аналогично, алгебраический смысл приближенного равенства (5.7) в силу определения (4.31) состоит в сохранении в отфильтрованном подпространстве направлений, отвечающих выделенным старшим сингулярным значениям матрицы. Имея в виду то, что величина $\mu_A(Y_k)$ может интерпретироваться как обобщенное обратное число обусловленности матрицы на подпространстве $\mathrm{Span}\,(Y_k)$, поэтому сохранение в соотношениях (5.4) столбцов таких, что имеют место соотношения (5.6) и (5.7), можно интерпретировать как попытку сохранения в отфильтрованном подпространстве направлений, отвечающих соответственно "младшим" и "старшим" обобщенным собственным значениям матрицы на подпространстве.

Рассмотрим сначала (5.7). Пусть $\{\sigma_j, v_j\}$, $j = 1, \ldots, m$, суть правые сингулярные пары матрицы

$$\widetilde{R}_m = [\{R_{k+m}\}_{*,k+1}, \ldots, \{R_{k+m}\}_{*,k+m}]\,,$$

упорядоченные в порядке невозрастания. Положим величину l, $0 \le l \le m$, равной количеству сингулярных чисел из набора $\{\sigma_j\}$, $j=1, \ldots, m$, которые больше некоторого заданного числа σ, $\sigma > 1$. Положим

$$U_l \;=\; [v_1, \ldots, v_l]. \tag{5.8}$$

Легко показать, что если $k + m = N$, то для матрицы $\widetilde{Y}_{k+l}$, построенной по (5.8), имеют место соотношения

$$\Psi_A(\widetilde{Y}_{k+l}) = \sigma_{l+1}^{-1} \ge \sigma^{-1}. \tag{5.9}$$

В случае $k + m < N$, или даже $k + m \ll N$, соотношения (5.9) выполнены лишь приближенно. Однако, как показывают численные эксперименты, эти соотношения выполняются тем лучше, чем сильнее отделены в сингулярном спектре $\{\sigma_j\}$, $j = 1, \ldots, m$, старшие l сингулярных чисел от остальных сингулярных чисел этого набора. Заметим также, что аналогом такого способа сохранения информации при рестартах в алгоритме GMRESE [4] и алгоритмах с неявными рестартами [1, 5] является попытка сохранить информацию о собственных векторах матрицы, соответствующих сильно отделенным старшим собственным значениям. Подчеркнем, что при подходящем выборе переобуславливателя сингулярные значения матрицы кластеризованы вокруг 1. Если при этом старшие сингулярные числа не сильно отделены от остальной части сингулярного спектра, то в таких случаях нет необходимости использовать описанный выше способ частичного сохранения сингулярной информации при рестартах.

Рассмотрим теперь приближенное равенство (5.6). Покажем прежде всего как можно явно вычислить величину $\Theta_A(Y_k)$, $k < N$. Пусть $W_k^{\perp}$ – дополнение к W_k до ортонормированного базиса в $\mathbb{R}^N$. Обозначим

$$T = (W_k^{\perp})^T \ A^T \ W_k^{\perp} \tag{5.10}$$

и пусть

$$T_+ = \frac{T + T^T}{2} \tag{5.11}$$

– это симметричная часть T. Пусть $\{\lambda_j\}$, $j = 1, \dots, N-k$, – собственные числа симметричной матрицы T_+, упорядоченные в порядке неубывания. Легко показать, что имеет место равенство

$$\Theta_A(Y_k) = \begin{cases} \lambda_1, & \text{если} \ \ \lambda_1 > 0, \\ 0, & \text{если} \ \ \lambda_1 \le 0 \ \ \text{и} \ \ \lambda_{N-k} \ge 0, \\ |\lambda_{N-k}|, & \text{если} \ \ \lambda_{N-k} < 0. \end{cases} \tag{5.12}$$

Теперь запишем первое из равенств (3.12) в QR форме:

$$A[Y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+m}] = [W_k, w_{k+1}, \dots, w_{k+m}] \begin{bmatrix} R_k & R_k^I \\ 0 & R_k^{II} \end{bmatrix}. \tag{5.13}$$

Если при этом $k + m = N$, то, в силу ортогональности матриц $[Y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+m}]$ и $[W_k, w_{k+1}, \dots, w_{k+m}]$, из (5.13) следует равенство

$$A^T [W_k, w_{k+1}, \dots, w_{k+m}] =$$

$$= [Y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+m}] \begin{bmatrix} R_k^T & 0 \\ (R_k^I)^T & (R_k^{II})^T \end{bmatrix}, \tag{5.14}$$

в частности

$$A^T[w_{k+1},\dots,w_{k+m}] = [y_{k+1},\dots,y_{k+m}](R_k^{II})^T. \tag{5.15}$$

В случае $k+m<N$ равенство (5.15) уже не имеет места, однако мы будем предполагать, что имеет место приближенное равенство

$$A^T[w_{k+1},\dots,w_{k+m}] \approx [y_{k+1},\dots,y_{k+m}](R_k^{II})^T. \tag{5.16}$$

Это приближенное равенство выполнено тем точнее, чем быстрее убывают новые внедиагональные элементы матрицы R_k^{II} при увеличении числа направлений в равенстве (5.13).

Используя приближенное равенство (5.16), можно оценить $\Theta_A(Y_k)$. Для этого рассмотрим легко вычислимую матрицу

$$T_m = [w_{k+1},\dots,w_{k+m}]^T[y_{k+1},\dots,y_{k+m}](R_k^{II})^T. \tag{5.17}$$

Из приближенного равенства (5.16) следует соотношение

$$T_m \approx [w_{k+1},\dots,w_{k+m}]^T A^T [w_{k+1},\dots,w_{k+m}],$$

поэтому

$$(T_m)_+ \equiv \frac{T_m+T_m^T}{2} \approx$$

$$\approx [w_{k+1},\dots,w_{k+m}]^T \frac{A+A^T}{2}[w_{k+1},\dots,w_{k+m}]. \tag{5.18}$$

С другой стороны, из определения (5.11) матрицы T_+ следует равенство

$$T_+ = (W_k^\perp)^T\ \frac{A+A^T}{2}\ W_k^\perp. \tag{5.19}$$

Сравним выражения (5.18) и (5.19). Столбцы матрицы $W_k^\perp$ по определению образуют дополнение к W_k до ортонормированного базиса в $\mathbb{R}^N$. Поэтому в качестве первых m столбцов матрицы $W_k^\perp$ мы можем выбрать векторы $w_{k+1},\dots,w_{k+m}$. Но тогда, учитывая равенство $(W_k^\perp)^T W_k^\perp = I_{N-k}$, из выражений (5.18) и (5.19) получаем, что симметричная матрица $(T_m)_+$ есть приближенная в смысле (5.16) Галеркинская проекция симметричной матрицы T_+ на соответствующее подпространство. Если теперь $\{\lambda_j^{(m)}, x_j^{(m)}\}$,

$j = 1, \dots, m$, – собственные пары $(T_m)_+$, собственные числа которых упорядочены в порядке неубывания, то имеет место приближенное равенство

$$\Theta_A(Y_k) \approx \begin{cases} \lambda_1^{(m)}, & \text{если } \lambda_1^{(m)} > 0, \\ 0, & \text{если } \lambda_1^{(m)} \le 0 \text{ и } \lambda_m^{(m)} \ge 0, \\ |\lambda_m^{(m)}|, & \text{если } \lambda_m^{(m)} < 0. \end{cases} \tag{5.20}$$

Более того, собственные пары матрицы $(T_m)_+$ можно использовать для того, чтобы выбрать те линейные комбинации направлений y_{k+j}, $j = 1, \dots, m$, которые необходимо оставить в отфильтрованных соотношениях, чтобы при этом имело место приближенное равенство (5.6). Покажем, как это можно сделать.

Прежде всего заметим, что в определении характеристики $\Theta_A(Y_k)$ учитывается ортогональность вектора w к подпространству $\operatorname{Span}(W_k)$ образа матрицы A на подпространстве $\operatorname{Span}(Y_k)$, а не ортогональность к $\operatorname{Span}(Y_k)$, как это было в случае характеристики $\Psi_A(Y_k)$. Поэтому для выполнения приближенного условия (5.6) необходимо таким образом выбрать линейные комбинации векторов y_{k+j}, $j = 1, \dots, m$, чтобы подпространство образов Ay_{k+j}, $j = 1, \dots, m$, после умножения на матрицу коэффициентов содержало все соответствующее линейные комбинации. Более точно это можно сформулировать следующим образом.

Для заданного числа λ, $0 < \lambda < 1$, пусть l, $0 \le l \le m$, есть количество собственных чисел из набора $\{\lambda_j^{(m)}\}$, $j = 1, \dots, m$, таких, что $\lambda_j^{(m)} < \lambda$. Выберем матрицу с ортонормированными столбцами U_l так, чтобы для соотношений (3.13) с отфильтрованной матрицей имело бы место включение

$$\operatorname{Span}\{[w_{k+1}, \dots, w_{k+m}][x_1^{(m)}, \dots, x_l^{(m)}]\} \subset \operatorname{Span}\{\widetilde{W}_{k+l}\}, \tag{5.21}$$

где $x_1^{(m)}, \dots, x_l^{(m)}$ – соответствующие собственные векторы матрицы $(T_m)_+$. Чтобы добиться выполнения включения (5.21), вычислим

$$Z_l = R_{k+m}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ x_1^{(m)}, \dots, x_l^{(m)} \end{bmatrix}. \tag{5.22}$$

Имеем тождество

$$A[Y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+m}]Z_l = [w_{k+1}, \dots, w_{k+m}][x_1^{(m)}, \dots, x_l^{(m)}].$$

Если теперь обозначить

$$Z_l = \begin{bmatrix} Z_l^I \\ Z_l^{II} \end{bmatrix}, \quad Z_l^I \in \mathbb{R}^{k\times l}, \quad Z_l^{II} \in \mathbb{R}^{m\times l}, \tag{5.23}$$

и вычислить QR разложение матрицы Z_l^{II} в виде

$$Z_l^{II} = U_l \widetilde{Z}_l^{II}, \tag{5.24}$$

получим, что для матрицы U_l, вычисленной по формулам (5.22), (5.23) и (5.24), и для соответствующих соотношений (3.13) имеет место включение (5.21). Если бы при этом имело место равенство $k + m = N$, то, как нетрудно показать,

$$\Theta_A(\widetilde{Y}_{k+l}) \geq \lambda. \tag{5.25}$$

На самом деле $k + m < N$, тем не менее построим матрицу U_l по формулам (5.22), (5.23) и (5.24). Этот выбор не гарантирует выполнения неравенства (5.25), однако в силу монотонности характеристики $\Theta_A(Y_k)$ по подпространству можно ожидать, что рано или поздно после, возможно, нескольких рестартов, внутренних итераций и фильтраций, для новой расширенной матрицы $\widetilde{Y}_{k+l}$ неравенство (5.25) будет иметь место.

Заметим также, что при вычислении U_l по формуле (5.24) используются только m последних компонент Z_l. Чтобы вычислить только последние m компоненты Z_l достаточно в (5.22) использовать только m последних строк верхней треугольной матрицы R_{k+m}.

5.3. Комбинирование различных способов фильтрации

Выше в Разделах 5.1 и 5.2 были описаны 3 различных способа выбора параметров l и U_l для сохранения части информации при рестарте. При проведении итераций алгоритма SOFGMRES(m) необходимо одновременно обеспечивать и монотонность падения нормы невязки при рестартах, и частичное сохранение спектральной/сингулярной информации для поддержания высокой скорости сходимости. Добиться этого можно следующим способом.

Пусть U_{l_j}, $j = 1, 2, 3,$ – матрицы с ортонормированными столбцами, раздельно построенные как было описано выше для сохранения части информации при рестарте. Составим из этих матриц одну матрицу с ортонормированными столбцами. Для этого вычислим QR разложение матрицы $[U_{l_1}, U_{l_2}, U_{l_3}]$ в виде

$$[U_{l_1}, U_{l_2}, U_{l_3}] = U_l S_l. \tag{5.26}$$

Построенная таким образом матрица с ортонормированными столбцами U_l, $l = l_1 + l_2 + l_3$, является искомой матрицей, которая должна использоваться на Stage II алгоритма SOFGMRES(m) при фильтрации расширенных матричных соотношений. Действительно, по построению U_l имеет место вложение

$$\mathrm{Span}\,(U_{l_1}) \cup \mathrm{Span}\,(U_{l_2}) \cup \mathrm{Span}\,(U_{l_3}) \subset \mathrm{Span}\,(U_l).$$

Поэтому фильтрация с U_l расширенных матричных соотношений очевидно гарантирует монотонность падения нормы невязки при рестартах. С другой стороны, если для соответствующих U_{l_2} и U_{l_3} имели место приближенные равенства (5.7) и (5.6) соответственно, то тем более они имеют место для единой матрицы U_l в силу монотонности характеристик $\Theta_A(Y_k)$ и $\Psi_A(Y_k)$ при расширении подпространства.

Арифметические затраты и затраты памяти в алгоритме SOFGMRES(m) тем выше, чем большее количество направлений необходимо хранить при проведении вычислений, т.е., мы заинтересованы хранить как можно меньше направлений в процессе вычислений. При проведении комбинированной фильтрации, описанной выше, при каждом рестарте алгоритма сохраняется как минимум одно направление для обеспечения монотонности падения нормы невязки при рестартах. Если рестартов много, то такой подход может привести к появлению большого количества сохраненных направлений, наличие которых в матричных соотношениях не приводит к поддержанию высокой скорости сходимости. Поэтому имеет смысл при всех рестартах иметь только один столбец в матричных соотношениях, который бы отвечал за монотонность падения нормы невязки. Этого можно добиться следующим способом.

Поставим матрицу с ортонормированными столбцами, отвечающую за монотонность падения нормы невязки, последней справа в левой части равенства (5.26). При этом только последний столбец результирующей матрицы U_l будет содержать информацию о текущем приближении к решению. В полученных после этого отфильтрованных матричных соотношениях (3.13) будем считать, что одна итерация нового цикла итераций алгоритма SOFGMRES(m) уже сделана; это позволит при фильтрации на последующем рестарте снова иметь в соотношениях (3.13) только один столбец, отвечающий за монотонность падения нормы невязки, и т.д.

В процессе проведения фильтраций выбор сохраняемых направлений подчинен условиям (5.9) и (5.25). В силу определения (4.32) такая параметризация алгоритмов фильтрации означает, что фактически мы добиваемся выполнения неравенства

$$\mu_A(\widetilde{Y}_{k+l}) \geq \frac{\lambda}{\sigma}. \tag{5.27}$$

Если при надлежашем выборе параметров σ и λ неравенство (5.27) выполнено для текущего $\widetilde{Y}_{k+l}$, то в силу теории сходимости алгоритма SOFGMRES(m) из Раздела 4 это означает хороший выбор начального подпространства $\mathrm{Span}\,(\widetilde{Y}_{k+l})$ и хорошую последующую сходимость на внутренних итерациях.

Рассмотрим более подробно важный вопрос о том, на основе какой вычисляемой в алгоритме информации можно сделать аргументированный вывод о выполнении соотношений (5.9) и (5.25), а также следствия из них – неравенства (5.27). Ответ на этот вопрос позволит утверждать, что оценка теории сходимости алгоритма SOFGMRES(m) содержит величину $\mu_A(Y_k)$, которую можно с достаточной степенью точности оценить в процессе итераций алгоритма SOFGMRES(m). Это же будет означать и возможность предсказывать дальнейшее поведение алгоритма, что также немаловажно.

Предполагая, что при каждом рестарте и фильтрации мы вычисляем старшее сингулярное значение матрицы $\widetilde{R}_m$ и спектр симметричной матрицы $(T_m)_+$, мы можем от рестарта к рестарту проследить поведение оценок величин $\Theta_A(Y_k)$ и $\Psi_A(Y_k)$. Как правило, оценка величины $\Psi_A(Y_k)$ через старшее сингулярное значение матрицы $\widetilde{R}_{k+m}$ достаточно точна. Что касается $\Theta_A(Y_k)$, то до тех пор, пока оценка величины $\Theta_A(Y_k)$ остается нулевой в силу незнакоопределенности матрицы $(T_m)_+$, никаких выводов о гарантированной линейной сходимости алгоритма SOFGMRES(m) мы сделать не можем. Однако как только матрица $(T_m)_+$ становится знакоопределенной и, тем более, как только оценка $\Theta_A(Y_k)$ вычисляемая через спектр матрицы $(T_m)_+$, начинает расти от рестарта к рестарту, у нас появляются веские основания считать, что достаточно точная оценка величины $\Theta_A(Y_k)$ для построенного к этому моменту подпространства $\mathrm{Span}\,(Y_k)$ у нас уже имеется.

5.4. Алгоритм SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией

В алгоритме SOFGMRES(m) от рестарта к рестарту постоянно увеличивается число направлений, сохраненных в Y_k. Это может приводить к большим затратам памяти и вычислений. Поэтому мы предлагаем использовать еще один способ фильтрации направлений – так называемую двойную фильтрацию, суть которой состоит в следующем.

При последовательном накоплении информации при множественных рестартах в соотношениях могут накапливаться “лишние” с точки зрения теории сходимости подпространства. Для того, чтобы вовремя избавиться от “лишних” подпространств и, одновременно, всегда иметь малое число рабочих направлений, предлагается процесс фильтрации проводить в два этапа. На первом этапе проводится некоторое количество рестартов с фильтрациями, в которых используется описанный ниже способ отбраковки направлений. На втором этапе проводится единая окончательная фильтрация всех текущих направлений с учетом исходных критериев фильтрации. Алгоритмически такой подход можно сформулировать следующим образом.

Для некоторых λ и σ из критериев фильтрации (5.25) и (5.9) соответственно зададим некоторые целые неотрицательные числа s_{double}, $s_{\text{double}} > 1$, и $l_{\min}$, $1 < l_{\min} < m$, а также некоторое λ_{double}, $\lambda \le \lambda_{\text{double}} < 1$. Параметр $s_{\text{double}} - 1$ есть количество внутренних рестартов в схеме двойной фильтрации, при которых используются условие фильтрации (5.9), условие фильтрации

$$\Theta_A(\widetilde{Y}_{k+l}) \ge \lambda_{\text{double}}, \tag{5.28}$$

а также условие

$$l \ge l_{\min}. \tag{5.29}$$

Если суммарное число векторов, полученное из (5.9) и (5.28) не удовлетворяет последнему условию, то дополнительно сохраняемые векторы – это векторы из критерия (5.28), отвечающие младшим собственным значениям матрицы $(T_m)_+$. Таким образом, после $s_{\text{double}} - 1$ внутренних рестартов будет сохранено не менее чем $(s_{\text{double}}-1)(l_{\min}-1)+1$ векторов. После проведения внутренних итераций на последней итерации цикла внутренних рестартов схемы двойной фильтрации проводится последняя фильтрация всех построенных направлений в соответствии с критериями (5.25) и (5.9).

Алгоритм 5.1. <u>SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией</u>

Step 0. Инициализация:

$x_0 = 0$;
Пусть для некоторых k_* и k, $1 \le k_* \le k+1$, имеют место начальные матричные соотношения (2.4) и равенство (3.5);

For $d = 1, \ldots, d_{\max}$ Do (Внешний цикл: рестарты схемы двойной фильтрации)

$k_0 = k$;
For $s = 1, \ldots, s_{\text{double}}$ Do (Внешний цикл: внутренние рестарты)

Stage I. <u>Построение расширенных матричных соотношений</u> (см. Алгоритм 3.1)

В результате выполнения **Stage I** получаем расширенные матричные соотношения (3.12);

Stage II. **<u>Фильтрация расширенных матричных соотношений</u>**

If $s \neq s_{\text{double}}$ then
В процессе проведения фильтраций используются критерии фильтрации (5.9), (5.28) и (5.29) (см. также Алгоритм 3.1);
Else
Переобозначим $m := k + m - k_0, \quad k := k_0$;
В этих обозначениях имеют место расширенные матричные соотношения (3.12);
В процессе проведения фильтраций используются критерии фильтрации (5.9) и (5.25) (см. также Алгоритм 3.1)
End If

В результате выполнения **Stage II** получаем отфильтрованные матричные соотношения (3.13);
На следующей итерации матричные соотношения (3.13) будем рассматривать как новые начальные матричные соотношения (2.4);

Restart: переобозначим $Y_{k+l} := \widetilde{Y}_{k+l}$, $P_{k+l+1} := \widetilde{P}_{k+l+1}$,

$H_{k+l} := \widetilde{H}_{k+l}$, $\gamma_{k+l+1} := \begin{bmatrix} \gamma_{k+1} \\ 0 \end{bmatrix}$, $k := k + l$

End For

End For

Можно ожидать, что подобный алгоритм с точки зрения промежуточных затрат памяти и арифметических затрат может вести себя приблизительно как алгоритм SOFGMRES $((s_{\text{double}} - 1)(l_{\min} - 1) + m)$, в то время как с точки зрения свойств сходимости он ведет себя приблизительно как алгоритм SOFGMRES$((s_{\text{double}} - 1)(m - 1) + m)$. Отсюда, в частности, следует, что при выборе параметров s_{double} и $l_{\min}$ имеет смысл придерживаться соотношения

$$(s_{\text{double}} - 1)(l_{\min} - 1) \approx m.$$

Сохраненные после нескольких двойных фильтраций направления также, по-видимому, имеет смысл фильтровать совместно для уменьшения последующих затрат. В наших численных экспериментах в этом не было необходимости, поскольку число двойных фильтраций всегда было небольшим.

6. Результаты численных экспериментов

В этом разделе мы представляем результаты численных экспериментов для алгоритма SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией.

Численные эксперименты проводились с блочными $q \times q$ тестовыми матрицами коэффициентов A из [1] вида

$$A = \begin{bmatrix} T & (\beta-1)I_q & & 0 \\ -(\beta+1)I_q & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & (\beta-1)I_q \\ 0 & & -(\beta+1)I_q & T \end{bmatrix} \qquad (6.1)$$

с $q \times q$ диагональными блоками

$$T = \begin{bmatrix} 4-\xi & \gamma-1 & & 0 \\ -\gamma-1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \gamma-1 \\ 0 & & -\gamma-1 & 4-\xi \end{bmatrix},$$

где $\gamma = \dfrac{p_1}{q+1}$, $\beta = \dfrac{p_2}{q+1}$ и $\xi = \dfrac{p_3}{(q+1)^2}$, правая часть b бралась в виде вектора, составленного из всех единиц. Во всех экспериментах для нулевого начального приближения использовался критерий остановки вида

$$\frac{||r_j||}{||r_0||} < 10^{-10}.$$

Выбор (6.1) тестовых задач из [1] связан с тем, что он позволяет провести численное сравнение алгоритма SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией с существующими алгоритмами: алгоритмом GMRES без рестартов, алгоритмом GMRES(k) с рестартами [6] и алгоритмом IRGMRES с неявными рестартами [1]. С другой стороны, простая параметризация матрицы (6.1) позволяет провести также эксперименты на последовательности задач увеличивающейся размерности, чтобы проследить динамику поведения различных алгоритмов. При этом при анализе различных алгоритмов основное внимание было сосредоточено на сравнении следующих характеристик:

1) количество итераций алгоритма по сравнению с числом итераций в алгоритме GMRES без рестартов;

2) максимальное количество векторов, одновременно хранимых в памяти в процессе вычислений для различных алгоритмов;

3) схемные (т.е., полные арифметические затраты без учета затрат на умножение на матрицу коэффициентов) арифметические затраты.

Ниже в таблицах используются следующие обозначения:

MVM – число внутренних итераций, необходимых для достижения сходимости, т.е., полное число умножений матрицы на вектор;

NVS – число векторов, сохраненных при рестартах в алгоритмах SOFGMRES и IRGMRES;

TV – максимальное число векторов, одновременно хранимых в памяти;

Costs – арифметические затраты на реализацию итерационного алгоритма, исключая затраты на умножение матрицы на вектор, в терминах эквивалентного числа скалярных произведений.

В Таблице 1 представлены численные результаты для алгоритмов SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией, GMRES без рестартов, GMRES(k) с рестартами [6] и IRGMRES с неявными рестартами [1], примененные к модельным системам (2.1) для различных значений параметров p_1, p_2 и p_3. При этом параметры алгоритма SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией для каждой из задач представлены в Таблице 2.

Таблица 1

Problem	N	Method	MVM	NVS	TV	Costs
$q = 31$,		SOFGMRES(7)	166	12	61	$1.4e4$
$p_1 = 1$,		IRGMRES(20)	200	10	54	$1.3e4$
$p_2 = 2$,	961	GMRES(60)	360	0	62	$1.9e4$
$p_3 = 30$		Full GMRES	151	0	153	$2.2e4$
$q = 31$,		SOFGMRES(7)	217	14	61	$2.1e4$
$p_1 = 1$,		IRGMRES(20)	301	10	54	$2.0e4$
$p_2 = 2$,	961	GMRES(60)	1200	0	62	$7.5e4$
$p_3 = 80$		Full GMRES	185	0	187	$3.3e4$
$q = 31$,		SOFGMRES(7)	241	15	80	$3.0e4$
$p_1 = 1$,		IRGMRES(20)	317	10	54	$2.2e4$
$p_2 = 2$,	961	GMRES(60)	1680	0	62	$1.0e5$
$p_3 = 150$		Full GMRES	221	0	223	$4.6e4$
$q = 31$,		SOFGMRES(7)	140	11	51	$1.1e4$
$p_1 = 5$,		IRGMRES(20)	184	10	54	$1.2e4$
$p_2 = 10$,	961	GMRES(60)	180	0	62	$1.1e4$
$p_3 = 30$		Full GMRES	108	0	110	$1.2e4$
$q = 31$,		SOFGMRES(7)	168	11	54	$1.4e4$
$p_1 = 5$,		IRGMRES(20)	196	10	54	$1.3e4$
$p_2 = 10$,	961	GMRES(60)	300	0	62	$1.9e4$
$p_3 = 80$		Full GMRES	128	0	130	$1.6e4$
$q = 31$,		SOFGMRES(7)	253	23	92	$3.8e4$
$p_1 = 5$,		IRGMRES(20)	475	10	54	$3.2e4$
$p_2 = 10$,	961	GMRES(60)	> 5000	0	62	$> 3.2e5$
$p_3 = 150$		Full GMRES	190	0	192	$3.0e4$

Анализируя данные из Таблицы 1, можно сделать следующие выводы:

1. Алгоритм SOFGMRES(m) обладает значительно лучшими свойствами сходимости по сравнению с алгоритмом IRGMRES(k), даже если $m < k$.

2. Обеспечивая лучшую скорость сходимости, алгоритм SOFGMRES(m) сравним по арифметическим затратам и затратам памяти с алгоритмом IRGMRES(k) при $m < k$.

3. Число итераций в алгоритме SOFGMRES(m) во всех экспериментах не более чем на 10%–40% отличается от числа ите-

раций в алгоритме GMRES без рестартов, а по арифметическим затратам и затратам памяти он более эффективен, чем GMRES без рестартов и GMRES(k) с рестартами при $m \ll k$.

Таблица 2

Problem	σ	λ	s_{double}	$l_{\min}$	λ_{double}
$q = 31,\ \ p_1 = 1,$ $p_2 = 2,\ \ p_3 = 30$	9.0	0.05	10	2	0.1
$q = 31,\ \ p_1 = 1,$ $p_2 = 10,\ \ p_3 = 80$	9.0	0.05	10	2	0.1
$q = 31,\ \ p_1 = 1,$ $p_2 = 2,\ \ p_3 = 150$	9.0	0.05	10	2	0.1
$q = 31,\ \ p_1 = 5,$ $p_2 = 10,\ \ p_3 = 30$	9.0	0.1	6	2	0.3
$q = 31,\ \ p_1 = 5,$ $p_2 = 10,\ \ p_3 = 80$	9.0	0.1	6	2	0.3
$q = 31,\ \ p_1 = 5,$ $p_2 = 10,\ \ p_3 = 150$	9.0	0.07	14	2	0.6

Таблица 3

Problem	N	Method	MVM	NVS	TV	Costs
$q=62, p_1=5,$		SOFGMRES(20)	324	11	118	$4.5e4$
$p_2 = 10,$	3844	GMRES(150)	435	0	152	$6.4e4$
$p_3 = 100$		Full GMRES	270	0	272	$7.2e4$
$q=124, p_1=5,$		SOFGMRES(20)	603	31	133	$1.1e5$
$p_2 = 10,$	15376	GMRES(300)	851	0	302	$2.5e5$
$p_3 = 100$		Full GMRES	530	0	532	$3.2e5$
$q = 248, p_1 = 5,$		SOFGMRES(20)	1087	47	183	$2.6e5$
$p_2 = 10,$	61504	GMRES(600)	1675	0	602	$9.5e5$
$p_3 = 100$		Full GMRES	1037	0	1039	$1.1e6$

Нас также интересует динамика по размерности поведения итерационных алгоритмов для задач последовательно увеличивающегося размера. Для этого в Таблице 3 приведены результаты численных экспериментов для алгоритмов SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией, GMRES(k) с рестартами и GMRES без рестартов при фиксированных p_1, p_2, p_3 и различных q. В алгоритме SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией использовался следующий набор параметров: $\sigma = 9.0$, $\lambda = 0.03$, $s_{\text{double}} = 8$, $l_{\min} = 3$, $\lambda_{\text{double}} = 0.1$.

Анализируя данные из Таблицы 3, можно сделать следующие выводы:

1. Число итераций в алгоритме SOFGMRES(m) не более чем на 25% отличается от числа итераций в алгоритме GMRES без рестартов.

2. С ростом размерности матрицы коэффициентов в алгоритме SOFGMRES(m) наблюдается более слабый, чем линейный, рост полного числа используемых векторов **TV** и числа сохраненных векторов **NVS**. В то же время в алгоритмах GMRES без рестартов и GMRES с рестартами наблюдается рост числа векторов в 2 раза при увеличении размерности матрицы коэффициентов в 4 раза.

3. С ростом размерности матрицы коэффициентов в алгоритме SOFGMRES(m) наблюдается практически линейный рост схемных арифметических затрат **Costs** от числа итераций. В остальных алгоритмах наблюдается почти квадратичный рост схемных арифметических затрат при увеличении числа итераций.

Объединяя все вышесказанное, можно сделать следующие выводы:

1. Предложенный в данной работе алгоритм SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией при подходящем выборе параметров обладает свойствами сходимости, близкими к свойствам сходимости алгоритма GMRES без рестартов, и значительно превосходит свойства сходимости алгоритма GMRES с рестартами и алгоритма IRGMRES с неявными рестартами.
2. Схемные затраты и затраты памяти в алгоритме SOFGMRES(m) сравнимы с аналогичными затратами для алгоритма IRGMRES с неявными рестартами и могут быть значительно ниже, чем в алгоритме GMRES без рестартов и алгоритме GMRES с рестартами.
3. Для эффективности работы алгоритма SOFGMRES(m) существенным является тип распределения обобщенных собственных значений матрицы, т.е., распределение отрица-

тельных и близких к нулю положительных собственных значений симметричной части матрицы, а также распределение старших сингулярных значений матрицы. Наличие априорной информации о типе распределения обобщенных собственных значений матрицы позволяет правильно выбрать параметры фильтрации в алгоритме SOFGMRES(m) с двойной фильтрацией.

Наиболее интересными направлениями дальнейших исследований нам представляются:

(а) применение алгоритма SOFGMRES(m) для адаптивного улучшения качества переобуславливания;

(б) использование алгоритма SOFGMRES(m) для решения последовательности линейных систем с одной и той же матрицей коэффициентов и с правыми частями, последовательно возникающими на внутренних итерациях многоуровневых итерационных схем.

Литература

1. J. Baglama, D. Calvetti, G. H. Golub, and L. Reichel, *Adaptively preconditioned GMRES algorithms.* — SIAM J. Sci. Comput., **20**, #1, 243–269, 1998.
2. A. Chapman, Y. Saad, and L. Wigton, *High order ILU preconditioners for CFD problems.* — in: Technical Report of Minnesota Supercomputer Institute (1996).
3. R. W. Freund and N. M. Nachtigal, *QMR: a quasi-minimal residual method for non-Hermitian linear systems.* — Numer. Math., **60** (1991), 315–339.
4. R. B. Morgan, *A restarted GMRES method augmented with eigenvectors.* — SIAM J. Matrix Analysis and Applications, **16(4)** (1995), 1154–1171..
5. R. B. Morgan, *Implicitly Restarted GMRES and Arnoldi Methods for Nonsymmetric Systems of Equations,*. Technical Report (1997).
6. Y. Saad and M. H. Schultz, *GMRES: A generalized minimum residual algorithm for solving non-symmetric linear systems.* — SIAM J. Sci. Stat. Comput., **7** (1986), 856–869.
7. Y. Saad and J. Zhang, *BILUTM: A Domain-Based Multi-Level Block ILUT Preconditioner for General Sparse Matrices.* Technical Report of Minnesota Supercomputer Institute (1998).
8. D. C. Sorensen, *Implicit applications of polynomial filters in a k-step Arnoldi method.* — SIAM J. Math. Anal. Appl., **13** (1992), 357–385.
9. H.A. van der Vorst, *Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems.* — SIAM J. Sci. Stat. Comput., **13**, #2, (1992) 631–644.

Kharchenko S. A., Yeremin A. Yu. New GMRES(k) algorithms with explicit restarts and the analysis of their properties based on matrix relations in QR form.

The paper considers the problem of constructing a basic iterative scheme for solving systems of linear algebraic equations with unsymmetric and indefinite coefficient matrices. A new GMRES-type algorithm with explicit restarts is suggested. When restarting, this algorithm takes into account the spectral/singular data carried on by orthogonal matrix relations in the so-called QR form, which arise when performing inner iterations of Arnoldi type. The main idea of the algorithm developed is to organize inner iterations and the filtering of directions before restarting in such a way that, from a restart to another, matrix relations effectively accumulate information concerning the current approximate solution and, simultaneously, spectral/singular data, which allow the algorithm to converge with a rate comparable with that of the GMRES algorithm without restarts. Convergence theory is provided for the case of nonsingular, unsymmetric, and indefinite matrices. A bound for the rate of decrease of residual in the course of inner Arnoldi-type iterations is obtained. This bound depends on a spectral/singular characterization of the subspace spanned by the directions retained upon filtering and is used in developing efficient filtering procedures. Numerical results are provided.

Вычислительный Центр РАН
kharchen@ccas.ru

Поступило 5 мая 2000 г.

Научно-исследовательский
Вычислительный Центр МГУ
badger@vvv.srcc.msu.su