Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 268, 2000 г.

А. А. Никишин, А. Ю. Еремин

АВТОМАТИЧЕСКАЯ СХЕМА РЕГУЛИРОВАНИЯ РАЗМЕРА БЛОКА В БЛОЧНОМ МЕТОДЕ СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ

1. Введение

В работе [7] был предложен метод сопряженных градиентов с переменным размером блока (Variable Block Preconditioned Conjugate Gradient Method – VBPCG) для итерационного решения систем линейных алгебраических уравнений с симметричными положительно определенными матрицами коэффициентов. Было показано, что можно таким образом подобрать схему редукции размера блока, чтобы значительно сократить быстро растущие с размером блока арифметические затраты, сохраняя при этом скорость сходимости, близкую к скорости сходимости стандартного блочного метода сопряженных градиентов с постоянной блочностью. Более того, в некоторых случаях оказалось, что сходимость в VBPCG методе удается достичь за счет меньшего числа умножений переобусловленной матрицы на вектор, чем в обычном точечном методе сопряженных градиентов. К сожалению, в работе [7] не удалось сформулировать автоматическую процедуру редуцирования размера блока.

В настоящей работе рассматривается задача построения эффективной автоматической процедуры редукции блочного размера блочного метода сопряженных градиентов, позволяющего поддерживать скорость сходимости, сравнимую со скоростью сходимости блочного метода сопряженных градиентов с постоянным размером блока. Основная идея предложенной процедуры заключается в расщеплении подпространства, натянутого на столбцы текущей блочной матрицы направлений P_k, в прямую сумму взаимно сопряженных подпространств таких, что одно из них содер-

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

жит первый столбец матрицы P_k, а второе образовано вектором, минимизирующим отношение Релея–Ритца на множестве доступных линейных комбинаций остальных столбцов матрицы P_k.

Работа построена следующим образом. В Разделе 2 описан VBPCG алгоритм и предложенная процедура автоматической редукции размера блока. Приведенные в Разделе 3 результаты численных экспериментов с линейными системами, возникающими в задачах линейной упругости, показывают, что предложенная процедура всегда позволяет добиться сокращения арифметических затрат по сравнению с блочным методом с постоянной блочностью независимо от типа распределения младших собственных значений в переобусловленной матрице.

2. Алгоритм

В этом разделе мы сформулируем в общем виде алгоритм метода сопряженных градиентов с переменным размером блока применительно к решению систем линейных алгебраических уравнений с симметричными положительно определенными матрицами коэффициентов, переобусловленных при помощи симметрично расщепленного переобуславливателя. Мы также опишем автоматическую процедуру редуцирования размера блока для сформулированного нами алгоритма.

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b,$$

где $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ – симметричная положительно определенная матрица коэффициентов, $b \in \mathbb{R}^n$ – заданный вектор правой части, а $x \in \mathbb{R}^n$ – искомый вектор решения. Пусть задан также симметрично расщепленный переобуславливатель $M = G^T G$ такой, что

$$GAG^T \approx I,$$

и задано начальное приближение к решению x_o и начальный размер блока $s(0)$. Выберем случайную матрицу $\widetilde{W} \in \mathbb{R}^{n \times (s(0)-1)}$ такую, чтобы матрица начальных невязок $R_o = G[b - Ax_o, \widetilde{W}]$ имела полный ранг, тогда VBPCG алгоритм может быть записан в следующем виде (параметризованном относительно процедуры редукции размера блока):

Алгоритм VBPCG

(Метод сопряженных градиентов с переменным размером блока)

Шаг 0. Инициализация:

Вычислить матрицы начальных невязок и направлений:

$$y_o = G^{-T} x_o,$$
$$w_o = b - Ax_o,$$
$$P_o = R_o = G[w_o, \widetilde{W}].$$

For $i = 0, \dots, maxit$ Do

Шаг 1. Умножение матрицы направлений на переобусловленную матрицу:

$$\widehat{A}P_i := GAG^T P_i;$$

Шаг 2. Вычисление матрицы невязок $\widetilde{R}_{i+1}$:

$$\widetilde{R}_{i+1} = R_i - \widehat{A}P_i\alpha_i,$$

где блочный коэффициент $\alpha_i \in \mathbb{R}^{s(i)\times s(i)}$

определяется по формуле:

$$\alpha_i = (P_i^T \widehat{A} P_i)^{-1}(R_i^T R_i);$$

Шаг 3. Вычисление аппроксимации к вектору псевдорешения:

$$y_{i+1} = y_i + P_i\alpha_i e_1;$$

Шаг 4. Проверка критерия сходимости:

If $\|\widetilde{R}_{i+1}e_1\| < eps$ then :

Вычислить аппроксимацию к решению $\widetilde{x}^* = G^T y_{i+1}$;

Stop

End If

Шаг 5. Стадия редукции размера блока:

If *выполнен критерий редукции размера блока* then

Присвоить $s(i+1) = s(i) - 1$;

Вычислить проекцию $\xi_i \in \mathbb{R}^{s(i)}$;

Вычислить матрицу модификации $\varepsilon_i \in \mathbb{R}^{s(i)\times s(i+1)}$

Else

Присвоить $s(i+1) = s(i)$;

Присвоить $\varepsilon_i = I$

End If

Шаг 6. Модификация матрицы невязок $R_{i+1} \in \mathbb{R}^{n\times s(i+1)}$:

$$R_{i+1} = \widetilde{R}_{i+1}\varepsilon_i;$$

Шаг 7. Вычисление новой матрицы направлений:

$$P_{i+1} = R_{i+1} + P_i\widetilde{\beta}_i - \widehat{H}_i\widetilde{\gamma}_i,$$

где $\widetilde{\beta}_i = (R_i^T R_i)^{-1}(\widetilde{R}_{i+1}^T R_{i+1})$ и $\widetilde{\gamma}_i = \widehat{U}_i^T R_{i+1}$;

Шаг 8. Вычисление матриц редукции:

If $s(i+1) < s(i)$ then

Вычислить $\widehat{H}_{i+1} = [P_i\xi_i, \widehat{H}_i]$ и $\widehat{U}_{i+1} = [\widehat{A}P_i\xi_i, \widehat{U}_i]$

Else

Присвоить $\widehat{H}_{i+1} = \widehat{H}_i$ и $\widehat{U}_{i+1} = \widehat{U}_i$

End If

End For

Замечание 2.1 Мы предполагаем, что матрицы $\widehat{H}_o$ и $\widehat{U}_o$ “пустые”, т.е., число столбцов в этих матрицах на начальной стадии равно нулю.

Для того, чтобы упростить изложение, мы предполагаем, что матрица невязок R_{i+1} на **Шаге 6** имеет полный ранг, и, следовательно, все необходимые блочные коэффициенты обратимы. В противном случае мы можем применить технику редукции размера блока, описанную в [7] для случая матрицы невязок неполного ранга.

В работе [7] были описаны условия, которые на стадии редукции размера блока являются достаточными для обеспечения сходимости вышеописанного алгоритма к точному решению переобусловленной линейной системы в условиях отсутствия ошибок округления. Сформулируем эти условия в наших обозначениях:

Утверждение 2.1. *Алгоритм VBPCG корректно сформулирован и сходится в условиях отсутствия ошибок округления к точному решению переобусловленной линейной системы $\widehat{A}y = Gb$, если $\forall i \geqslant 0$ проекция $\xi_i \in \mathbb{R}^{s(i)}$ и матрица модификации $\varepsilon_i \in \mathbb{R}^{s(i)\times s(i+1)}$ на* **Шаге** 5 *Алгоритма VBPCG удовлетворяет следующим условиям:*

(i) $\operatorname{span}(P_i) = \operatorname{span}(H_i) \oplus \operatorname{span}(\widetilde{P}_i)$,
(ii) $\widetilde{P}_i^T \widehat{A} H_i = 0$ *и* $H_i^T \widehat{A} H_i = I$,
(iii) $\operatorname{rank}(\widetilde{R}_{i+1}\varepsilon_i) = s(i+1)$,
(iv) $\varepsilon_o \varepsilon_1 \ldots \varepsilon_i e_1 = e_1$,

где $\widetilde{P}_i = P_i \alpha_i \varepsilon_i$ *и* $H_i = P_i \xi_i$.

Более того, в этом случае асимптотическую скорость сходимости метода VBPCG можно оценить в терминах спектрального числа обусловленности положительно определенной матрицы оператора $Q^T\widehat{A}Q$, ограниченного на подпространство $\widehat{A}\mathcal{V}$, где

$$Q = I - \widehat{H}(\widehat{H}^T\widehat{A}\widehat{H})^{-1}\widehat{H}^T\widehat{A}$$

– $\widehat{A}$-ортогональный (сопряженный) проектор на подпространство $\mathcal{V} = \operatorname{span}(Q)$, а $\widehat{H}$ – матрица базиса редуцированного подпространства на последней итерации [2, 7].

Теорема 2.1 [2]. *Пусть m – размер подпространства* $\operatorname{span}(\widehat{A}\widehat{H})$. *Обозначим через $\mathcal{L}$ собственное подпространство, соответствующее младшим собственным значениям $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ матрицы $\widehat{A}$, а через $\mathcal{Q}_{\widehat{A}\mathcal{H}}$ и $\mathcal{Q}_{\mathcal{L}}$ ортогональные проекторы на подпространства* $\operatorname{span}(\widehat{A}\widehat{H})$ *и $\mathcal{L}$, соответственно. Тогда спектральное число обусловленности матрицы оператора $Q^T\widehat{A}Q \,|\, \widehat{A}\mathcal{V}$ удовлетворяет неравенству*

$$\kappa(Q^T\widehat{A}Q \,|\, \widehat{A}\mathcal{V}) \leqslant \frac{\lambda_n}{\sqrt{(1-\gamma)^2\lambda_{m+1}^2 + \gamma^2\lambda_1^2}}, \tag{1}$$

где $\gamma = \|\mathcal{Q}_{\widehat{A}\mathcal{H}} - \mathcal{Q}_{\mathcal{L}}\|_2$, а λ_n – максимальное собственное значение матрицы $\widehat{A}$.

Опишем теперь критерий и процедуру редукции размера блока, которые гарантируют выполнение вышеописанных условий и позволяют достичь высокой скорости сходимости, сравнимой с блочным методом CG с постоянной блочностью. Для этого нам понадобится следующая лемма:

Лемма 2.1. *Пусть верхняя треугольная матрица* $\widetilde{\varepsilon}_i \in \mathbb{R}^{s(i)\times s(i)}$ *удовлетворяет следующему разложению:*

$$\widetilde{\varepsilon}_i \widetilde{\varepsilon}_i^T = \alpha_i^{-1}(R_i^T R_i)^{-1}.$$

Тогда матрица $\widetilde{P}_i = P_i \alpha_i \widetilde{\varepsilon}_i$ *удовлетворяет следующим условиям:*

(i) $\widetilde{P}_i^T \widehat{A} \widetilde{P}_i = I$,
(ii) $\widetilde{P}_i^T \widetilde{P}_i = S_i^{-1}(P_i^T P_i)(P_i^T \widehat{A} P_i)^{-1} S_i$,

т.е., спектр матрицы $(\widetilde{P}_i^T \widetilde{P}_i)^{-1}$ *совпадает со спектром матрицы блочного отношения Релея* $(P_i^T \widehat{A} P_i)(P_i^T P_i)^{-1}$.

Доказательство.
(i) $\widetilde{P}_i^T \widehat{A} \widetilde{P}_i = \widetilde{\varepsilon}_i^T \alpha_i^T (P_i^T \widehat{A} P_i)\alpha_i \widetilde{\varepsilon}_i = \widetilde{\varepsilon}_i^T (R_i^T R_i)\alpha_i \widetilde{\varepsilon}_i = I$.
(ii) Легко проверить для $S_i = (R_i^T R_i)\widetilde{\varepsilon}_i$. □

Сформулируем теперь критерий редукции размера блока. Для $s(i) > 1$ обозначим $\widehat{P}_i = \widetilde{P}_i[e_2, \dots, e_{s(i)}]$ и рассмотрим спектральное разложение матрицы $\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i$:

$$\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i = V \widehat{\Lambda} V^T,$$

где $\widehat{\Lambda}$ – диагональная матрица собственных значений, а V – ортогональная матрица собственных векторов.
<u>Критерий редукции размера блока:</u>

Редуцируем блочный размер на **Шаге 5** в случае, если для заданного параметра τ выполнено следующее неравенство:

$$\lambda_{s(i)-1}^{-1}(\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i) < \tau, \tag{2}$$

где $\lambda_{s(i)-1}(\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i)$ – максимальное собственное значение матрицы $\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i$.

Процедура редукции размера блока:

Вектор проекции ξ_i вычисляется по формуле:

$$\xi_i = \alpha_i \widetilde{\varepsilon}_i \begin{pmatrix} 0 \\ v^{(i)}_{s(i)-1} \end{pmatrix}, \tag{3}$$

а матрица модификации ε_i – по формуле

$$\varepsilon_i = \widetilde{\varepsilon}_i \begin{pmatrix} \{\widetilde{\varepsilon}_i\}^{-1}_{11} & 0 \\ 0 & v^{(i)}_1 \dots v^{(i)}_{s(i)-2} \end{pmatrix}, \tag{4}$$

где $v^{(i)}_j$ – нормализованные собственные вектора матрицы $\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i$, соответствующие собственным значениям $\lambda_j(\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i)$.

Полученный вектор проекции ξ_i может быть уточнен при помощи процедуры нахождения оптимального интервала Леммана [8] для подпространства span $(\widehat{P}_i)$, соответсвующего значению $\lambda_{s(i)-1}(\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i)$. А именно, пусть $(\mu^{(i)}, z^{(i)})$ – решение следующей задачи минимизации:

$$\begin{cases} \text{минимизировать} \quad \|(\widehat{A} - \mu I)\widehat{P}_i z\| \quad \text{для} \quad \mu \in \mathbb{R},\ z \in \mathbb{R}^{s(i)-1} \\ \text{при условии} \quad \|\widehat{P}_i z\| = 1, \end{cases}$$

тогда существует собственное значение $\lambda_k(\widehat{A})$, для которого

$$|\lambda_k(\widehat{A}) - \mu^{(i)}| \leqslant \Delta,$$

где Δ^2 – младшее собственное значение обобщенной спектральной задачи

$$\widehat{P}_i^T (\widehat{A} - \mu^{(i)} I)^2 \widehat{P}_i z^{(i)} = \Delta^2 \widehat{P}_i^T \widehat{P}_i\, z^{(i)}.$$

Полученный интервал $[\mu^{(i)} - \Delta, \mu^{(i)} + \Delta]$ является наилучшим для собственного значения $\lambda_k(\widehat{A})$ среди всех интервалов вида

$$|\lambda_k(\widehat{A}) - \mu| \leqslant \|(\widehat{A} - \mu I) y\|,$$

где нормированный вектор y принадлежит подпространству span $(\widehat{P}_i)$.

В этом случае проекция ξ_i вычисляется по формуле:

$$\xi_i = \alpha_i \widetilde{\varepsilon}_i \begin{pmatrix} 0 \\ \|z^{(i)}\|^{-1} z^{(i)} \end{pmatrix}, \tag{5}$$

а матрица модификации ε_i – по формуле

$$\varepsilon_i = \widetilde{\varepsilon}_i \begin{pmatrix} \{\widetilde{\varepsilon}_i\}_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & \phi_1^{(i)} \dots \phi_{s(i)-2}^{(i)} \end{pmatrix}, \tag{6}$$

где $\phi_j^{(i)} = \|\widetilde{\phi}_j^{(i)}\|^{-1} \widetilde{\phi}_j^{(i)}$ и $\widetilde{\phi}_j^{(i)} = v_j^{(i)} - (v_j^{(i)}, z^{(i)})(z^{(i)}, z^{(i)})^{-1} z^{(i)}$, для $j = 1, \dots, s(i) - 2$.

Использование на **Шаге 6** и **Шаге 8** уточненых таким образом проекции и матрицы модификации делают поведение алгоритма VBPCG более устойчивым к ошибкам округления.

Легко доказать следующую теорему:

Теорема 2.2. *Пусть проекция ξ_i и матрица модификации ε_i вычислены по формулам* (3)–(4) *(или* (5)–(6)*). Рассмотрим вектор $H_i = P_i \xi_i$, тогда удовлетворены одновремено следующие условия:*

(i) $\operatorname{span}(P_i) = \operatorname{span}(H_i) \oplus \operatorname{span}(P_i \alpha_i \varepsilon_i)$,
(ii) $H_i^T \widehat{A} P_i \, \alpha_i \varepsilon_i = 0$ *и* $H_i^T \widehat{A} H_i = 1$,
(iii) $\varepsilon_o \varepsilon_1 \dots \varepsilon_i e_1 = e_1$.

Эта теорема показывает, что процедура редукции размера блока, описанная формулами (2)–(4) (или (2), (5)–(6)), удовлетворяет требованиям методов VBPCG из [7], и, следовательно, алгоритм VBPCG с описанной выше процедурой редукции размера блока принадлежит классу методов VBPCG из [7] и наследует все свойства этого класса методов. Ниже мы переформулируем некоторые свойства класса методов VBPCG из [7] применительно к рассматриваемому нами случаю.

Теорема 2.3. *Для $i > j \geqslant 0$ итеранты алгоритма VBPCG удовлетворяют следующим равенствам:*

$$R_i^T R_j = 0,$$
$$P_i^T \widehat{A} P_j = 0,$$
$$R_i^T P_j = 0.$$

Более того, для ("непустых") матриц базиса $\widehat{H}_j$ редуцированного подпространства выполнены следующие условия ортогональности:

$$P_i^T \widehat{A} \widehat{H}_j = 0 \quad и \quad R_i^T \widehat{H}_j = 0.$$

Доказательство. Смотри доказательства Теоремы 3.1 и Следствия 3.2 [7]. □

К сожалению, последнее равенство Теоремы 2.3 может не выполняться в условиях ошибок округления, поэтому мы используем реортогонализацию после **Шага 6**, когда это необходимо:

Реортогонализация матрицы текущих невязок к редуцированному подпространству:

If $s(i+1) < s(0)$ и $\|(\widehat{H}_i^T \widehat{H}_i)^{-1}(\widehat{H}_i^T R_{i+1})\| > eps\_orth$ then

Реортогонализовать матрицу текущих невязок к матрице $\widehat{H}_i$:

$R_{i+1} := R_{i+1} - \widehat{H}_i(\widehat{H}_i^T \widehat{H}_i)^{-1}(\widehat{H}_i^T R_{i+1})$

End If

Этот этап реортогонализации делает поведение Алгоритма VBPCG более стабильным в присутствии ошибок округления.

Теорема 2.4. *Пусть $\bar{Q}_i$ обозначает $\widehat{A}$ – ортогональный (сопряженный) проектор на подпространство $\mathcal{H}_i = \operatorname{span}(\widehat{H}_i)$ и $Q_i = I - \bar{Q}_i$, тогда текущий вектор аппроксимации к псевдорешению y_i минимизирует квадратичный функционал*

$$\mathcal{F}(y) = (y - y^*)^T \widehat{A}(y - y^*)$$

для всех $y \in \mathbb{R}^n$ таких, что

$$y - y_o \in \operatorname{span}\{Q_i R_o, Q_i \widehat{A} Q_i R_o, \dots, (Q_i \widehat{A})^i Q_i R_o\} \oplus \mathcal{H}_i,$$

где вектор y^* - вектор точного решения линейной системы $\widehat{A}y = Gb$.

Доказательство. Смотри доказательства Теоремы 3.5 и Следствия 3.6 [7]. □

Учитывая все выше изложенное мы можем окончательно сформулировать Алгоритм VBPCG в следующем виде:

Алгоритм VBPCG

(Метод сопряженных градиентов с переменным размером блока)

Шаг 0. Инициализация:

Вычислить матрицы начальных невязок и направлений:

$$
\begin{aligned}
&y_o = G^{-T} x_o,\\
&w_o = b - Ax_o,\\
&P_o = R_o = G[w_o, \widetilde{W}].
\end{aligned}
$$

For $i = 0, \dots, maxit$ Do

Шаг 1. Умножение матрицы направлений на переобусловленную матрицу:

$$\widehat{A}P_i := GAG^T P_i;$$

Шаг 2. Вычисление матрицы невязок $\widetilde{R}_{i+1}$:

$\widetilde{R}_{i+1} = R_i - \widehat{A}P_i\alpha_i,$

где блочный коэффициент $\alpha_i \in \mathbb{R}^{s(i)\times s(i)}$

определяется по формуле:

$\alpha_i = (P_i^T \widehat{A} P_i)^{-1}(R_i^T R_i);$

Шаг 3. Вычисление аппроксимации к вектору псевдорешения:

$$y_{i+1} = y_i + P_i\alpha_i e_1;$$

Шаг 4. Проверка критерия сходимости:

If $\|\widetilde{R}_{i+1}e_1\| < eps$ then :

Вычислить аппроксимацию к решению $\widetilde{x}^* = G^T y_{i+1};$

Stop

End If

Шаг 5. Стадия редукции размера блока:

Найти верхнюю треугольную матрицу $\widetilde{\varepsilon}_i$ такую, что
$\widetilde{\varepsilon}_i \widetilde{\varepsilon}_i^T = \alpha_i^{-1}(R_i^T R_i)^{-1}$;
Вычислить спектральное разложение матрицы $\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i$, где
$\widehat{P}_i = P_i \alpha_i \widetilde{\varepsilon}_i [e_2, \ldots, e_{s(i)}]$;
If $\lambda_{s(i)-1}^{-1}(\widehat{P}_i^T \widehat{P}_i) < \tau$ then
Присвоить $s(i+1) = s(i) - 1$;

$$\xi_i = \alpha_i \widetilde{\varepsilon}_i \begin{pmatrix} 0 \\ v_{s(i)-1}^{(i)} \end{pmatrix},$$

$$\varepsilon_i = \widetilde{\varepsilon}_i \begin{pmatrix} \{\widetilde{\varepsilon}_i\}_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & v_1^{(i)} \ldots v_{s(i)-2}^{(i)} \end{pmatrix}$$

Else
Присвоить $s(i+1) = s(i)$;
Присвоить $\varepsilon_i = I$
End If

Шаг 6. Модификация матрицы невязок $R_{i+1} \in \mathbb{R}^{n \times s(i+1)}$:

$R_{i+1} = \widetilde{R}_{i+1} \varepsilon_i$;
If $s(i+1) < s(0)$ и $\|(\widehat{H}_i^T \widehat{H}_i)^{-1}(\widehat{H}_i^T R_{i+1})\| > eps\_orth$ then
Реортогонализовать матрицу текущих невязок к матрице $\widehat{H}_i$:
$R_{i+1} := R_{i+1} - \widehat{H}_i(\widehat{H}_i^T \widehat{H}_i)^{-1}(\widehat{H}_i^T R_{i+1})$
End If

Шаг 7. Вычисление новой матрицы направлений:

$P_{i+1} = R_{i+1} + P_i \widetilde{\beta}_i - \widehat{H}_i \widetilde{\gamma}_i$,
где $\widetilde{\beta}_i = (R_i^T R_i)^{-1}(\widetilde{R}_{i+1}^T R_{i+1})$ и $\widetilde{\gamma}_i = \widehat{U}_i^T R_{i+1}$;

Шаг 8. Вычисление матриц редукции:

If $s(i+1) < s(i)$ then

Вычислить $\widehat{H}_{i+1} = [P_i\xi_i, \widehat{H}_i]$ и $\widehat{U}_{i+1} = [\widehat{A}P_i\xi_i, \widehat{U}_i]$

Else

Присвоить $\widehat{H}_{i+1} = \widehat{H}_i$ и $\widehat{U}_{i+1} = \widehat{U}_i$

End If

End For

3. Результаты численных экспериментов

В этом разделе представлены результаты численных экспериментов с линейными системами для четырех тестовых матриц, возникающими в задачах линейной упругости (SKIRT и Bridge) и в задачах тонкостенных облочкек (s4dkt3m2 и s4dkq4m4). Первая тестовая матрица может быть предоставлена авторами. Эту матрицу, но с постоянным диагональным сдвигом, который делает матрицу существенно лучше обусловленной, можно также найти в коллекции матриц Davis Collection [1]. Вторая матрица предоставлена М. Нейчевой (M. Neytcheva) из Католического Университета г. Неймегена, Нидерланды [6]. Третью тестовую матрицу можно найти в коллекции матриц Matrix Market Collection [5], а последняя матрица предоставлена Р. Кухия (R. Kouhia) из Хельсинского Технологического Университета [3]. Выбор тестовых матриц обусловлен необходимостью исследования поведения алгоритма VBPCG в случаях различных типов распределений младших собственных значений переобусловленных матриц. Для всех тестовых систем в качестве переобуславливателя были использованы факторизованные разреженные обратные [4].

В качестве критерия остановки был использован

$$\|w_k\|/\|w_o\| < 10^{-9} \quad \text{и} \quad \|w_k\|/\|w_o\| < 10^{-8}$$

для задач с матрицами SKIRT и Bridge, соответственно, и критерий

$$\|w_k\| < \|b\| \cdot 10^{-5} + 10^{-9}$$

для последних двух задач, здесь w_k обозначает невязку непереобусловленной системы $Ax = b$. Критерий остановки для последних двух задач предоставлен Р. Кухия.

В Таблице 1 представлены структурные характеристики четырех тестовых матриц. В этой таблицы используются следующие обозначенния:

N – размер линейной системы;
NZA – число ненулевых элементов исходной матрицы A;
NZG – число ненулевых элементов в факторе переобуславливателя G.

Таблица 1. Структурные характеристики тестовых линейных систем.

Матрица	N	NZA	NZG
SKIRT	45361	2771623	966482
Bridge	92862	3252978	6271069
s4dkt3m2	90449	3753461	13679069
s4dkq4m4	231119	12379001	36986044

Спектральные характеристики переобусловленных тестовых матриц представлены в Таблице 2. В этой таблице λ_i обозначает i-тое наименьшее собственное значение трехдиагональной матрицы, построенной с помощью коэффициентов метода сопряженного градиента, примененного для решения линейных систем с соответствующими переобусловленными тестовыми матрицами.

Таблица 2. Спектральные характеристики переобусловленных тестовых матриц.

	SKIRT	Bridge	s4dkt3m2	s4dkq4m4
λ_1	$0.10639e-4$	$0.74609e-6$	$0.36558e-9$	$0.11998e-9$
λ_2	$0.20367e-4$	$0.28429e-5$	$0.36833e-7$	$0.11815e-7$
λ_3	$0.42893e-4$	$0.86447e-5$	$0.43852e-6$	$0.14542e-6$
λ_4	$0.53236e-4$	$0.14677e-4$	$0.25800e-5$	$0.83634e-6$
λ_5	$0.93310e-4$	$0.23492e-4$	$0.98973e-5$	$0.32848e-5$
λ_6	$0.24649e-3$	$0.31882e-4$	$0.29425e-4$	$0.98305e-5$
λ_7	$0.25420e-3$	$0.44608e-4$	$0.73730e-4$	$0.24573e-4$
λ_8	$0.34429e-3$	$0.56526e-4$	$0.16770e-3$	$0.56019e-4$
λ_9	$0.37183e-3$	$0.86160e-4$	$0.33018e-3$	$0.10911e-3$
λ_{10}	$0.37703e-3$	$0.90692e-4$	$0.62882e-3$	$0.20408e-3$
$\lambda_{\max}$	2.2599	1.8575	2.0801	2.0934

Таблицы 3–6 содержат результаты численных экспериментов с переобусловленными тестовыми системами и в них используются следующие обозначения:

BPCG(k) обозначает стандартный метод блочного сопряженного градиента с размером блока k;

VBPCG(k, τ) обозначает метод сопряженных градиентов с переменным размером блока с начальным размером k и параметром критерия редукции τ;

Iter обозначает число итераций, необходимых для выполнения критерия остановки;

MVM обозначает тотальное число умножений переобусловленной матрицы на вектор;

ItCosts обозначает последовательные арифметические затраты на итерационную фазу решения без учета затрат на построение переобуславливателя в терминах числа умножений исходной матрицы A на вектор;

λ_1 обозначает младшее собственное значение блочно трехдиагональной матрицы $\bar{T}$, которое является оценкой младшего ненулевого собственного значения матрицы $Q^T\widehat{A}Q$ [7];

Cond обозначает спектральное число обусловленности блочно трехдиагональной матрицы $\bar{T}$ [7].

Таблица 3. Спектральные характеристи и сходимость различных методов для матрицы SKIRT.

Метод	Iter	MVM	ItCosts	λ_1	Cond
BPCG(1)	1281	1281	2482.40	$0.10639e-4$	$2.1241e+5$
BPCG(3)	513	1539	3330.13	$0.10639e-4$	$2.1241e+5$
VBPCG(3,2.0e-3)	892	1285	2784.32	$0.37814e-4$	$5.9764e+4$
VBPCG(3,5.0e-3)	1031	1289	2758.30	$0.18936e-4$	$1.1935e+5$
BPCG(5)	348	1740	4206.93	$0.10639e-4$	$2.1241e+5$
VBPCG(5,3.0e-3)	704	1328	3201.06	$0.49559e-4$	$4.5600e+4$
VBPCG(5,6.0e-3)	900	1320	3114.82	$0.14422e-4$	$1.5670e+5$
BPCG(7)	274	1918	5131.94	$0.10639e-4$	$2.1241e+5$
VBPCG(7,3.0e-3)	590	1371	3653.28	$0.49140e-4$	$4.5989e+4$
VBPCG(7,6.0e-3)	798	1340	3480.79	$0.20435e-4$	$1.1059e+5$

Анализируя данные, представленные в Таблицах 3–6, можно сделать следующие выводы:

Таблица 4. Спектральные характеристи и сходимость различных методов для матрицы Bridge.

Метод	Iter	MVM	ItCosts	λ_1	Cond
BPCG(1)	1626	1626	8319.03	$0.74609e-6$	$2.4896e+6$
BPCG(3)	556	1668	8918.16	$0.74609e-6$	$2.4896e+6$
VBPCG(3,6.0e-5)	666	1305	7040.67	$0.28154e-5$	$6.5975e+5$
VBPCG(3,8.0e-5)	668	1306	7045.79	$0.28141e-5$	$6.6005e+5$
BPCG(6)	244	1464	8473.85	$0.74609e-6$	$2.4896e+6$
VBPCG(6,2.0e-5)	260	1370	8104.63	$0.28419e-5$	$6.5361e+5$
VBPCG(6,4.0e-5)	366	1385	8137.47	$0.52846e-5$	$3.5149e+5$
VBPCG(6,8.0e-5)	330	1132	6671.20	$0.53930e-5$	$3.4442e+5$
BPCG(10)	146	1460	9674.66	$0.74609e-6$	$2.4896e+6$
VBPCG(10,6.0e-5)	150	1298	8505.74	$0.55507e-5$	$3.3464e+5$
VBPCG(10,8.0e-5)	179	1304	8483.01	$0.60053e-5$	$3.0930e+5$
VBPCG(10,2.0e-4)	237	1099	7160.90	$0.60237e-5$	$3.0836e+5$

Таблица 5. Спектральные характеристи и сходимость различных методов для матрицы s4dkt3m2.

Метод	Iter	MVM	ItCosts	λ_1	Cond
BPCG(1)	1302	1302	11087.18	$0.36558e-9$	$5.6898e+9$
BPCG(3)	291	873	7628.59	$0.36558e-9$	$5.6899e+9$
VBPCG(3,1.0e-6)	306	840	7398.01	$0.39380e-8$	$5.2822e+8$
VBPCG(3,3.0e-6)	451	840	7379.19	$0.68658e-8$	$3.0297e+8$
BPCG(5)	166	830	7457.16	$0.36558e-9$	$5.6898e+9$
VBPCG(5,1.0e-6)	169	805	7320.25	$0.30103e-8$	$6.9100e+8$
VBPCG(5,4.0e-6)	178	747	6788.80	$0.10665e-7$	$1.9504e+8$
BPCG(7)	124	868	8012.89	$0.36558e-9$	$5.6898e+9$
VBPCG(7,2.0e-6)	131	766	7174.63	$0.12222e-7$	$1.7020e+8$
VBPCG(7,5.0e-6)	142	743	6958.66	$0.15516e-7$	$1.3406e+8$

1. Независимо от типа распределения младших собственных значений переобусловленных матриц (почти равномерного в случае задачи SKIRT и почти геометрического в случае задач s4dkt3m2 и s4dkq4m4) предложенная процедура автоматической редукции блока позволяет поддерживать скорость сходимости, сравнимую со скоростью сходимости метода CG с постоянной блочностью, при заметном сокращении числа умножений переобусловленной матрицы на вектор.

Таблица 6. Спектральные характеристи и сходимость различных методов для матрицы s4dkq4m4.

Метод	Iter	MVM	ItCosts	λ_1	Cond
BPCG(1)	2208	2208	15783.37	$0.11998e-9$	$1.7448e+10$
BPCG(3)	459	1377	10076.16	$0.11998e-9$	$1.7448e+10$
VBPCG(3,1.0e-6)	469	1341	9885.65	$0.47507e-9$	$4.4064e+9$
VBPCG(3,5.2e-6)	467	1334	9834.08	$0.47470e-9$	$4.4099e+9$
BPCG(5)	276	1380	10355.84	$0.11998e-9$	$1.7448e+10$
VBPCG(5,2.0e-6)	283	1323	10037.76	$0.10337e-8$	$2.0251e+9$
VBPCG(5,5.0e-6)	293	1232	9345.78	$0.32095e-8$	$6.5224e+8$
VBPCG(5,8.0e-6)	321	1245	9437.43	$0.32144e-8$	$6.5126e+8$
BPCG(7)	204	1428	10985.70	$0.11998e-9$	$1.7448e+10$
VBPCG(7,5.0e-6)	217	1313	10234.49	$0.39703e-8$	$5.2726e+8$
VBPCG(7,8.0e-6)	225	1283	9999.11	$0.71017e-8$	$2.9477e+8$
VBPCG(7,1.0e-5)	237	1227	9559.49	$0.77475e-8$	$2.7020e+8$

2. Предложенная процедура автоматической редукции блока позволяет добиться тем большего сокращения числа умножений переобусловленной матрицы на вектор, чем больше размер начального блока алгоритма VBPCG.

3. Независимо от типа распределения младших собственных значений переобусловленных матриц предложенная схема автоматической редукции блока позволяет значительно сократить арифметические затраты **ItCosts** по сравнению с блочным методом CG с постоянной блочностью.

Литература

1. T. Davis, *Sparse matrix collection.* http://www.cise.ufl.edu/~davis/sparse, University of Florida, June 1997.
2. Z. Dostál, *Conjugate gradient method with preconditioning by projector.* Int. J. Comput. Math., **32** (1988), 315-323.
3. R. Kouhia, *Personal communication.*
4. L. Yu. Kolotilina and A. Yu. Yeremin, *Factorized sparse approximate inverse preconditionings. I. Theory.* SIAM J. Matrix Anal. Appl., **14** (1993), 45-58.
5. *Matrix Market sparse matrix collection.* National Institute of Standards and Technology, http://www.nist gov/MatrixMarket, 2000.
6. M. Neytcheva, *Personal communication.*
7. A. A. Nikishin and A. Yu. Yeremin, *Variable Block CG Algorithms for Solving Large Sparse Symmetric Positive Definite Linear Systems on Parallel Computers, I: General Iterative Scheme.* SIAM J. Matrix Anal. Appl., **16**(4) (1995), 857-877.

8. C. C. Paige, *The computation of eigenvalues of very large sparse matrices.* Ph. D. Thesis, University of London, 1971.

Nikishin A. A., Yeremin A. Yu. An automatic scheme for updafing the block size in the block conjugate gradient method for solving linear systems.

The paper considers the problem of constructing on efficient automatic procedure for reducing the block size in the block conjugate gradient method providing for the rate of convergence comparable with that of the block conjugate gradient method with constant block size. Results of numerical experiments show that, independently of the type of distribution of the smallest eigenvalues of the preconditioned matrix, the procedure suggested always leads to a decrease of arithmetic costs with respect to those of the block method with constant block size.

Вычислительный Центр
Российской Академии Наук
117967 Москва, ул. Вавилова, д.40,
E-mail: nikishin@ccas.ru

Поступило 15 июня 2000 г.

Научно-исследовательский
Вычислительный Центр МГУ,
119899 Москва, Воробьевы Горы, МГУ
E-mail: badger@vvv.srcc.msu.su