

УДК 519.6

Предобусловливание GMRES методом косоэрмитовых итераций*

Л.А. Крукиер, Т.С. Мартынова

Институт математики, механики и компьютерных наук Южного федерального университета, просп. Стачки, 200/1, корп. 2, Ростов-на-Дону, 344090

E-mails: krukier@sfedu.ru (Крукиер Л.А.), martynova@sfedu.ru (Мартынова Т.С.)

Крукиер Л.А., Мартынова Т.С. Предобусловливание GMRES методом косоэрмитовых итераций // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд.-ние. — Новосибирск, 2016. — Т. 19, № 3. — С. 267–279.

Исследован класс предобусловливателей для решения систем линейных алгебраических уравнений с неэрмитовой положительно-определенной матрицей, построенный на основе эрмитового и косоэрмитового расщепления матрицы системы. Дано его обобщение для решения систем уравнений с седловой матрицей, которая имеет полуопределенный или вырожденный $(1, 1)$ блок. Для решения таких систем использован метод расширенного Лагранжиана. Показано, что использование рассмотренных предобусловливателей эффективно при итерационном решении систем линейных алгебраических уравнений методом GMRES.

DOI: 10.15372/SJNM20160303

Ключевые слова: эрмитово и косоэрмитово расщепление матрицы, итерационные методы, предобусловливание, методы подпространств Крылова, система уравнений с седловой матрицей.

Krukier L.A., Martynova T.S. Preconditioning of GMRES by the skew-Hermitian iterations // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2016. — Vol. 19, № 3. — P. 267–279.

A class of preconditioners for solving non-Hermitian positive definite systems of linear algebraic equations is proposed and investigated. It is based on the Hermitian and skew-Hermitian splitting of the initial matrix. The generalization for saddle point systems which have semidefinite or singular $(1, 1)$ blocks is given. Our approach is based on an augmented Lagrangian formulation. It is shown that such preconditioners are effective for the iterative solution of systems of linear algebraic equations by the GMRES.

Keywords: Hermitian and skew-Hermitian splitting, iterative methods, preconditioning, Krylov subspace method, saddle point linear system.

1. Введение

Теория итерационных методов для систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) обширна и достаточно развита. При решении СЛАУ одним из ключевых понятий является предобусловливание, т. е. выбор некоторых матриц, существенно влияющих на скорость сходимости методов.

Одним из актуальных направлений в теории итерационных методов является ее развитие для решения широкого класса седловых задач [1]. Теория релаксационных и обобщенных методов для решения седловых задач, а также проблемы предобусловливания подробно исследованы в [2]. Для решения СЛАУ большой размерности, как правило,

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 15-01-00441-а, № 15-51-53066 ГФЕН-а), Минобрнауки РФ (гос. задание ВУЗов, базовая часть, проект № 1420).

используются методы подпространств Крылова, такие как GMRES, но они имеют слабую скорость сходимости, когда применяются к седловым задачам. Поэтому требуется создание хороших предобусловливателей для того, чтобы улучшить скорость сходимости данных методов.

Рассмотрим итерационное решение большой разреженной СЛАУ:

$$Av = b, \quad b \in \mathbb{C}^n, \quad (1)$$

где $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — неэрмитова положительно-определенная матрица.

Предобусловливание означает, что система (1) заменяется системой $B^{-1}Av = B^{-1}b$, где матрица B есть приближение к A со следующими свойствами: матрица $B^{-1}A$ лучше обусловлена, и система $Bv = b$ решается легко. Продуманный выбор B может сделать число обусловленности матрицы $B^{-1}A$ много меньшим числа обусловленности матрицы A и тем самым ускорить сходимость. Вместе с тем на данный момент не существует единой теории предобусловливания. В ряде случаев удается добиться локализации спектра предобусловленной матрицы около единицы. Иногда стремятся к тому, чтобы матрица $B^{-1}A$ имела небольшое число собственных значений на периферии своего спектра. Таким образом, большая часть современных исследований по итерационным методам ориентирована на отыскание эффективных предобусловливателей.

Матрицу A системы (1) представим в виде суммы эрмитовой и косоэрмитовой частей:

$$A = A_0 + A_1, \quad (2)$$

где

$$A_0 = \frac{1}{2}(A + A^*), \quad A_1 = \frac{1}{2}(A - A^*). \quad (3)$$

Положительная определенность A означает, что для любого $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$, $x^*Ax > 0$. Пусть $\|A_0\| \ll \|A_1\|$ в некоторой матричной норме $\|\cdot\|$, т. е. матрица A является сильно неэрмитовой [3]. Эта ситуация возникает, например, при дискретизации уравнений Навье-Стокса, когда конвективные члены сильно доминируют [4]. Кроме того, в данной работе предполагается, что $\text{diag}(A_1) = 0$. Это условие удовлетворяется автоматически, если элементы матрицы A вещественные.

Представим косоэрмитову часть A_1 матрицы A в виде

$$A_1 = K_L + K_U, \quad (4)$$

где K_L и K_U строго нижне- и верхнетреугольная матрицы соответственно. Очевидно, что $K_L = -K_U^*$.

На основе расщеплений (2)–(4) в [5, 6] предложены классы треугольных (ТКМ) и попеременно-треугольных (ПТКМ) косоэрмитовых (кососимметрических) итерационных методов для решения системы (1). В данной работе рассматриваются методы, относящиеся к ПТКМ.

Метод 1 (ПТКМ). Пусть задано начальное приближение $v^{(0)}$ и положительные параметры ω и τ . Для $p = 0, 1, \dots$ до достижения сходимости последовательности приближений $\{v^{(p)}\}$ вычислять

$$v^{(p+1)} = G(\omega, \tau)v^{(p)} + \tau B(\omega)^{-1}b,$$

где $G(\omega, \tau) = B(\omega)^{-1}(B(\omega) - \tau A)$, а $B(\omega) \in \mathbb{C}^{n \times n}$ определяется следующим образом:

$$B(\omega) = \left(B_c + \frac{\omega}{2} K_L \right) B_c^{-1} \left(B_c + \frac{\omega}{2} K_U \right).$$

Здесь $B_c \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — эрмитова положительно-определенная матрица.

В [7] исследован двухпараметрический метод, для которого

$$B(\omega_1, \omega_2) = (B_c + \omega_1 K_L) B_c^{-1} (B_c + \omega_2 K_U), \quad (5)$$

где ω_1 и ω_2 — неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

В [8, 9] предложен двухшаговый косоэрмитов итерационный метод (ДКМ), даны достаточные условия сходимости метода и выбор оптимальных итерационных параметров. Матрица $B(\omega)$ для ДКМ имеет вид

$$B(\omega) = \left(B_c + \frac{\omega}{2} \widehat{K}_L \right) B_c^{-1} \left(B_c + \frac{\omega}{2} \widehat{K}_U \right), \quad (6)$$

где $\widehat{K}_L = K_L + H_0$, $\widehat{K}_U = K_U - H_0$, $H_0 \in \mathbb{C}^{n \times n}$, — некоторая эрмитова матрица, $B_c \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — эрмитова положительно-определенная матрица. Очевидно, что $\widehat{K}_L = -\widehat{K}_U^*$, $A_1 = (K_L + H_0) + (K_U - H_0) = \widehat{K}_L + \widehat{K}_U$.

В случае, когда $H_0 = 0$, ДКМ сводится к ПТКМ; специальный выбор матрицы H_0 [8] позволяет улучшить сходимость метода.

В [10] авторами предложен обобщенный косоэрмитов треугольный метод GSTS (Generalized Skew-Hermitian Triangular Splitting) для решения седловых СЛАУ, блочно-структурированная матрица которых имеет положительно-определенный $(1, 1)$ блок.

В данной работе исследуются свойства матрицы $B(\omega)$ из (6), используемой в качестве предобусловливателя для решения СЛАУ (1). В пункте 2 доказана лемма о локализации спектра матрицы $B(\omega)^{-1}A$ и теорема об асимптотической скорости сходимости предобусловленного метода GMRES.

Для седловых задач рассмотрен более общий случай, когда $(1, 1)$ матричный блок блочно-структурированной СЛАУ является положительно-полуопределенным или вырожденным. Для решения СЛАУ с такой матрицей используется метод расширенного Лагранжиана. В п. 3 доказана теорема о распределении спектра матрицы $B^{-1}(\omega_1, \omega_2)A$, где предобусловливатель $B(\omega_1, \omega_2)$ есть обобщение $B(\omega_1, \omega_2)$ из (5) для седловых задач. Полученный результат позволяет наилучшим образом выбирать матрицы, необходимые для построения данного предобусловливателя.

В п. 4 приводятся численные эксперименты для каждой из проблем.

2. Решение СЛАУ с неэрмитовой положительно-определенной матрицей методом ДКМ+GMRES

Представим матрицу $B(\omega)$, определяемую (6), так же, как и исходную матрицу A , в виде суммы ее эрмитовой и косоэрмитовой частей. Тогда

$$B(\omega) = B_0(\omega) + B_1(\omega), \quad (7)$$

где

$$\begin{cases} B_0(\omega) = \frac{1}{2}(B(\omega) + B(\omega)^\top) = B_c + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 \widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U, \\ B_1(\omega) = \frac{1}{2}(B(\omega) - B(\omega)^\top) = \frac{\omega}{2}(\widehat{K}_L + \widehat{K}_U) = \frac{\omega}{2}A_1. \end{cases}$$

Предположим, что

$$\begin{aligned} 0 < \alpha_h I \leq A_0 \leq \beta_h I, & \quad 0 < \alpha_c I \leq B_c \leq \beta_c I, \\ \alpha_l I \leq \widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U \leq \beta_l I, & \quad \alpha_s I \leq B_0(\omega) \leq \beta_s I, \end{aligned}$$

где I — единичная матрица. Поскольку A_0 и B_c — эрмитовы положительно-определенные матрицы, $B_0(\omega)$ и $\widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U$ — эрмитовы матрицы, то границы α_ξ и β_ξ , $\xi = h, c, l, s$, легко вычисляются.

Потребуем положительной определенности $B(\omega)$ из (7). Поскольку матрица $\widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U$ является отрицательно-определенной, то $B_0(\omega) > 0$, если $\omega \in (0, \omega_{\max})$, где $\omega_{\max} = 2\sqrt{\left(-\frac{\alpha_c}{\alpha_l}\right)}$.

Заметим, что α_l и β_l удовлетворяют следующим неравенствам:

$$\alpha_s \geq \alpha_c + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 \alpha_l, \quad \beta_s \leq \beta_c + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 \beta_l.$$

Следующая лемма определяет локализацию спектра предобусловленной матрицы СЛАУ (1) в случае применения ДКМ-предобусловливателя (6). Будем обозначать спектр матрицы A как $\sigma(A)$.

Лемма. Пусть матрицы A и $B(\omega)$ из (6) положительно определены. Тогда $\sigma(B(\omega)^{-1}A)$ содержится в одном из следующих трех кругов:

$$\begin{aligned} C_1 : \left(x - \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_h} + \frac{1}{\omega}\right)\right)^2 + y^2 &= \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_h} - \frac{1}{\omega}\right)^2, & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega}, \\ C_2 : \left(x - \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} + \frac{1}{\omega}\right)\right)^2 + y^2 &= \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} - \frac{1}{\omega}\right)^2, & \text{если } \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega}, \\ C_3 : \left(x - \frac{1}{2}\left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} + \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right)\right)^2 + y^2 &= \frac{1}{4}\left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right)^2, & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}. \end{aligned}$$

Доказательство. Пусть $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \in \sigma(B(\omega)^{-1}A)$ и $x \in \mathbb{C}^n$ — соответствующий собственный вектор. Тогда

$$B(\omega)^{-1}A = \left(B_0(\omega) + \frac{\omega}{2}A_1\right)^{-1}(A_0 + A_1)$$

и

$$\begin{aligned} \lambda B(\omega)x &= Ax, \\ \lambda &= \frac{x^*Ax}{x^*B(\omega)x} = \frac{x^*A_0x + x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x + \frac{\omega}{2}x^*A_1x} = \frac{\frac{x^*A_0x}{x^*B_0(\omega)x} + \frac{x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x}}{1 + \frac{\omega}{2}\frac{x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x}} = \frac{2}{\omega} + \frac{\frac{x^*A_0x}{x^*B_0(\omega)x} - \frac{2}{\omega}}{1 + \frac{\omega}{2}\frac{x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x}}. \end{aligned}$$

Легко показать, что если $\lambda = a + \frac{b}{1+ic}$, то $\forall a, b, c \in \mathbb{R}$ все λ лежат на окружности с центром $\left(a + \frac{1}{2}b, 0\right)$ и радиусом $\frac{1}{2}|b|$, где i — мнимая единица. Для удобства введем величины:

$$m = \frac{x^*A_0x}{x^*B_0(\omega)x}, \quad \eta = \frac{1}{i}\frac{x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x}.$$

Тогда

$$\lambda = \frac{2}{\omega} + \frac{m - \frac{2}{\omega}}{1 + i \frac{\omega}{2} \eta}.$$

Следовательно, собственные значения λ матрицы $B(\omega)^{-1}A$ лежат на окружности с центром $\left(\frac{m}{2} + m\frac{1}{\omega}, 0\right)$ и радиусом $\left|\frac{m}{2} - \frac{1}{\omega}\right|$.

Поскольку $\frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq m \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}$, то все эти окружности содержатся в кругах:

$$\left(x - \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} + \frac{1}{\omega}\right)\right)^2 + y^2 = \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} - \frac{1}{\omega}\right)^2 \quad \text{и} \quad \left(x - \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} + \frac{1}{\omega}\right)\right)^2 + y^2 = \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega}\right)^2.$$

Очевидно, что эти круги касаются в точке $\left(\frac{2}{\omega}, 0\right)$, а двумя другими точками пересечения с осью абсцисс являются $\left(\frac{\alpha_h}{\beta_s}, 0\right)$ и $\left(\frac{\beta_h}{\alpha_s}, 0\right)$. Возможны три случая расположения данных точек на оси абсцисс:

$$\frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega}, \quad \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega}, \quad \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s},$$

в соответствии с которыми и получаем локализацию спектра матрицы $B(\omega)^{-1}A$ в одном из кругов C_1 , C_2 или C_3 . \square

Теперь, используя лемму, можно получить результат для оценки асимптотической скорости сходимости метода ДКМ+GMRES.

Теорема 1. Пусть A и $B(\omega)$ из (6) положительно определены, и матрица $B(\omega)^{-1}A$ диагонализуема. Тогда асимптотическая скорость сходимости предобусловленного метода GMRES с использованием ДКМ-предобусловливателя для решения СЛАУ (1) определяется величиной

$$\varrho(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)) = \begin{cases} \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega}\right) / \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} + \frac{1}{\omega}\right), & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega}, \\ \left(\frac{1}{\omega} - \frac{\alpha_h}{2\beta_s}\right) / \left(\frac{1}{\omega} + \frac{\alpha_h}{2\beta_s}\right), & \text{если } \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega}, \\ \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right) / \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} + \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right), & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}. \end{cases} \quad (8)$$

Доказательство. Используем ДКМ для ускорения GMRES. Тогда p -я невязка предобусловленного GMRES выражается как

$$r^{(p)} = B(\omega)^{-1}(b - Av^{(p)}) = \mathcal{P}_p(B(\omega)^{-1}A)r^{(0)}, \quad \mathcal{P}_p \in \Pi_p, \quad \mathcal{P}_p(0) = 1,$$

где Π_p — множество полиномов степени не выше, чем p . На каждом итерационном шаге GMRES вычисления осуществляются так, что

$$\|r^{(p)}\|_2 = \min_{\mathcal{P}_p \in \Pi_p, \mathcal{P}_p(0)=1} \left\{ \|\mathcal{P}_p(B(\omega)^{-1}A)r^{(0)}\|_2 \right\}.$$

Если матрица $B(\omega)^{-1}A$ диагонализуема и $B(\omega)^{-1}A = X\Lambda X^{-1}$, то

$$\frac{\|r^{(p)}\|_2}{\|r^{(0)}\|_2} \leq k_2(X) \min_{\mathcal{P}_p \in \Pi_p, \mathcal{P}_p(0)=1} \max_{\lambda \in \Upsilon(B(\omega)^{-1}A)} |\mathcal{P}_p(\lambda)|,$$

где $k_2(X) = \|X\|_2 \|X^{-1}\|_2$. Тогда сходимость метода GMRES определяется величиной [11]:

$$\varrho_p(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)) = \min_{\mathcal{P}_p \in \Pi_p, \mathcal{P}_p(0)=1} \max_{\lambda \in \Upsilon(B(\omega)^{-1}A)} |\mathcal{P}_p(\lambda)|,$$

где $\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)$ — множество, содержащее спектр матрицы $B(\omega)^{-1}A$, а асимптотическая скорость сходимости предобусловленного метода GMRES:

$$\varrho_p(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)) = \lim_{p \rightarrow \infty} \varrho_p(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A))^{\frac{1}{p}}.$$

Пусть $\mathbb{E}(a, b, c, d)$ — эллипс с центром в точке d , фокусами $d \pm c$ и полуосями a и b , где $c^2 = a^2 - b^2$. Если известно, что $\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)$ содержится в эллипсе $\mathbb{E}(a, b, c, d)$, который расположен в правой полуплоскости и не включает начало координат, то асимптотическая скорость сходимости предобусловленного метода GMRES определяется величиной [11]:

$$\varrho(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)) = \frac{a+b}{d + \sqrt{d^2 - c^2}}. \quad (9)$$

Тогда эллипс $\mathbb{E}(a, b, c, d)$, имеющий наименьшую площадь из всех эллипсов, содержащих $\sigma(B(\omega)^{-1}A)$, описывается следующими группами параметров ($c = 0$):

$$\left\{ \begin{array}{llll} a = \frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega}, & b = \frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega}, & d = \frac{\beta_h}{2\alpha_s} + \frac{1}{\omega}, & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega}, \\ a = \frac{1}{\omega} - \frac{\alpha_h}{2\beta_s}, & b = \frac{1}{\omega} - \frac{\alpha_h}{2\beta_s}, & d = \frac{\alpha_h}{2\beta_s} + \frac{1}{\omega}, & \text{если } \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega}, \\ a = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s} \right), & b = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s} \right), & d = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} + \frac{\alpha_h}{\beta_s} \right), & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}. \end{array} \right.$$

Подставляя значения a, b, d в (9), получаем (8). □

3. Предобусловливание СЛАУ с седловой матрицей

Характерной задачей, приводящей к решению СЛАУ с седловой матрицей, является следующая задача квадратичного программирования: необходимо найти минимум u целевого функционала $J(u) \equiv \frac{1}{2}u^*Mu - u^*f$ при наличии $q \leq p$ линейных ограничений $Eu = g$:

$$\begin{pmatrix} M & E^* \\ E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где $M = M^* \in \mathbb{C}^{p \times p}$ — положительно-полуопределенная матрица, $E \in \mathbb{C}^{q \times p}$ — прямоугольная матрица полного ранга, $q \leq p$; $u, f \in \mathbb{C}^p$; $\mu, g \in \mathbb{C}^q$. Данной задаче соответствует функционал Лагранжа $\mathcal{L}(u, \mu) = J(u) + \mu^*(Eu - g)$, где μ — вектор Лагранжевых множителей. Заметим, что матрица блочно-структурированной СЛАУ (10) невырождена тогда и только тогда, когда [12]:

$$\begin{cases} \text{rank}(E^*) = q, \\ \ker(E) \cap \ker(M) = \{0\}. \end{cases}$$

Преобразуем (10) к эквивалентной неэрмитовой СЛАУ, матрица которой имеет спектр, лежащий в правой полуплоскости [1, 13]:

$$\begin{pmatrix} M & E^* \\ -E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ -g \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Рассмотрим случай, когда (1,1) матричный блок полуопределен или вырожден. Будем использовать метод расширенного Лагранжиана, который состоит в замене (11) на СЛАУ:

$$\mathcal{A}\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \widetilde{M} & E^* \\ -E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f + \gamma E^* g \\ -g \end{pmatrix} = \mathbf{F}, \quad (12)$$

в которой M заменяется на матрицу $\widetilde{M} \equiv M + \gamma E^* E$, являющуюся положительно-определенной для всех $\gamma > 0$, если E имеет полный ранг [1, 14]. Очевидно, что (12) имеет то же самое решение, что и (11). Наиболее эффективен выбор $\gamma = \|M\|_2 / \|E\|_2^2$ [14]. В этом случае число обусловленности как (1,1) блока, так и всей матрицы коэффициентов является наименьшим.

Представим матрицу \mathcal{A} из (12), аналогично (2), в виде суммы ее эрмитовой и косоэрмитовой составляющих

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_1, \quad \mathcal{A}_0 = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & E^* \\ -E & 0 \end{bmatrix}.$$

Косоэрмитову матрицу \mathcal{A}_1 , в свою очередь, представим в виде

$$\mathcal{A}_1 = \mathcal{K}_L + \mathcal{K}_U = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -E & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & E^* \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где 0 — нулевая матрица подходящей размерности, \mathcal{K}_L и \mathcal{K}_U — строго нижне- и строго верхнетреугольные матрицы, $\mathcal{K}_L = -\mathcal{K}_U^*$.

Определим матрицу \mathcal{B}_C следующим образом: $\mathcal{B}_C = \begin{bmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{bmatrix}$, где B_1 и B_2 — эрмитовы невырожденные матрицы.

Метод 2 (GSTS [10]). Пусть задано начальное приближение $\mathbf{w}^{(0)} = (u^{(0)}, \mu^{(0)}) \in \mathbb{C}^{(p+q)}$ и положительный итерационный параметр τ . Для $k = 0, 1, 2, \dots$ до достижения сходимости последовательности итерационных приближений $\{\mathbf{w}^{(k)}\}$, вычислять

$$\begin{cases} B_2 \mu^{(k+1)} = B_2 \mu^{(k)} + \tau [\omega_1 E B_1^{-1} (f - M u^{(k)} - E^* \mu^{(k)}) + E u^{(k)} - g], \\ B_1 u^{(k+1)} = B_1 u^{(k)} - \tau M u^{(k)} + E^* [(\omega_2 - \tau) \mu^{(k)} - \omega_2 \mu^{(k+1)}] + \tau f, \end{cases}$$

где ω_1 и ω_2 — неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

GSTS-предобуславливатель определяется следующим образом [10]:

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = (\mathcal{B}_C + \omega_1 \mathcal{K}_L) \mathcal{B}_C^{-1} (\mathcal{B}_C + \omega_2 \mathcal{K}_U) \quad (13)$$

или в блочной форме

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = \begin{bmatrix} B_1 & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E B_1^{-1} E^* \end{bmatrix},$$

где ω_1 и ω_2 — неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

Возьмем в качестве матрицы $B_1 = \widetilde{M}$. Способы выбора матрицы B_2 рассмотрим позднее. Тогда

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E \widetilde{M}^{-1} E^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} \end{bmatrix},$$

где $\widetilde{S} = E \widetilde{M}^{-1} E^*$ — дополнение Шура для \widetilde{M} .

Предобусловленная (слева) блочная СЛАУ имеет вид

$$\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A} \mathbf{w} = \mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathbf{F}. \quad (14)$$

Исследуем спектр предобусловленной матрицы из (14).

Теорема 2. Пусть матрицы \mathcal{A} и $\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)$ определяются (12) и (13) соответственно и $B_1 = \widetilde{M}$. Пусть $\lambda \in \sigma(\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A})$. Тогда для собственных чисел предобусловленной матрицы имеет место выражение

$$\lambda = \frac{\nu - \tilde{\omega} \xi \pm \sqrt{(\nu - \tilde{\omega} \xi)^2 - 4 \xi \nu}}{2 \nu},$$

где $\xi = \frac{z^* \widetilde{S} z}{z^* z}$, $\nu = \frac{z^* B_2 z}{z^* z}$, а параметр $\tilde{\omega} = \omega_1 \omega_2 - \omega_1 - \omega_2$.

Доказательство. Пусть $\lambda \in \sigma(\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A})$ и $(y^*, z^*)^* \in \mathbb{C}^{p+q}$ — соответствующий собственный вектор, где $y \in \mathbb{C}^p$, $z \in \mathbb{C}^q$. Тогда имеем

$$\begin{bmatrix} \widetilde{M} & E^* \\ -E & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}$$

или эквивалентно

$$\begin{cases} (1 - \lambda) \widetilde{M} y = (\lambda \omega_2 - 1) E^* z, \\ (\lambda \omega_1 - 1) E y = \lambda B_2 z - \lambda \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} z. \end{cases} \quad (15)$$

Пусть $\lambda \neq 1$. Иначе, если $\lambda = 1$, уравнения (15) сводятся к

$$\begin{cases} (\omega_2 - 1) E^* z = 0, \\ (\omega_1 - 1) E y = B_2 z - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} z \end{cases} \quad (16)$$

и существует ненулевой вектор $(y_1^*, 0)^* \in \mathbb{C}^{p+q} \setminus \{0\}$ такой, что уравнения (16) справедливы для $y_1 \in \mathbb{C}^p \setminus \{0\}$. Если $\lambda \neq 1$, то из первого уравнения (15) имеем

$$y = \frac{\lambda \omega_2 - 1}{1 - \lambda} \widetilde{M}^{-1} E^* z.$$

Подставляя это соотношение во второе уравнение в (15), получаем

$$\left(\frac{(\lambda \omega_1 - 1)(\lambda \omega_2 - 1)}{1 - \lambda} + \lambda \omega_1 \omega_2 \right) \widetilde{S} z = \lambda B_2 z$$

или

$$(\lambda\tilde{\omega} + 1)\tilde{S}z = \lambda(1 - \lambda)B_2z, \quad (17)$$

где $\tilde{\omega} = \omega_1\omega_2 - \omega_1 - \omega_2$. Для удобства введем величины $\xi = \frac{z^*\tilde{S}z}{z^*z}$ и $\nu = \frac{z^*B_2z}{z^*z}$, тогда после умножения (17) слева на z^* и деления на z^*z обеих частей этого выражения получаем

$$(\lambda\tilde{\omega} + 1)\xi = \lambda(1 - \lambda)\nu,$$

т. е. λ является корнем квадратного уравнения

$$\nu\lambda^2 - (\nu - \tilde{\omega}\xi)\lambda + \xi = 0. \quad (18)$$

Из (18) непосредственно следует утверждение теоремы 2. \square

Заметим, что когда $\tilde{\omega} = -1$, корнями (18) являются $\lambda = 1$ и $\lambda = \xi/\nu$.

Практический вывод, который следует из доказанной теоремы, следующий. Если $\tilde{\omega} = -1$ и $\xi = \nu$, то все собственные числа предобусловленной матрицы $\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2)\mathcal{A}$ равны 1, а это означает, что для эффективности рассмотренного предобусловливателя матрица B_2 должна максимально удачно аппроксимировать дополнение Шура \tilde{S} .

В частности, если $B_2 = \tilde{S}$ и $\omega_1 = \omega_2 = 1$, то предобусловленная матрица имеет простую блочную форму

$$\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2)\mathcal{A} = \begin{bmatrix} I & (\tilde{M}^{-1} - I)E^* \\ 0 & I \end{bmatrix}.$$

4. Численные эксперименты

Для оценки эффективности ДКМ-предобусловливателя проводилось его сравнение с ПТКМ и USOR [15]. Методом GMRES(10) и предобусловленным методом PGMRES(10) решалась СЛАУ, полученная в результате пятиточечной центрально-разностной аппроксимации стационарного уравнения конвекции-диффузии в единичном квадрате $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$.

Пример 1.

$$-\text{Pe}^{-1}\Delta U + \frac{1}{2} \left[v_1 \frac{\partial U}{\partial x} + v_2 \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial(v_1 U)}{\partial x} + \frac{\partial(v_2 U)}{\partial y} \right] = F, \quad U|_{\partial\Omega} = 0, \quad (19)$$

где Pe — число Пекле, $v = (v_1, v_2)$ — вектор скоростей. С использованием условия несжимаемости среды $\text{div } v = \frac{\partial v_1}{\partial x} + \frac{\partial v_2}{\partial y} = 0$ уравнение (19) записано в так называемом “симметричном” виде [3, 16].

Задача (19) решалась на равномерной сетке 32×32 . Коэффициенты $v_i = v_i(x, y)$ ($i = 1, 2$), данные в таблице 1, удовлетворяют условию несжимаемости среды. Функция $F(x, y)$ удовлетворяет точному решению $U(x, y) = e^{xy} \sin(\pi x) \sin(\pi y)$. Начальное приближение бралось нулевым, и итерационный процесс прекращался, если $\frac{\|r^{(p)}\|_2}{\|r^{(0)}\|_2} \leq 10^{-6}$, где $r^{(p)}$ — невязка на текущей итерации, $r^{(0)}$ — начальная невязка. В табл. 1 дано число итераций (ИТ) и CPU-время (CPU). Численные тесты выполнены для значений $\text{Pe} = 10^3, 10^4, 10^5$. Для ПТКМ и ДКМ $B_c = I$, значения параметров взяты из [6, 8]. Для ДКМ-предобусловливателя H_0 выбирается так, чтобы матрица $(H_0 + K_L)$ являлась унитарной [8].

Численные тесты показали, что ДКМ-предобусловливание GMRES(10) существенно эффективнее, чем USOR и ПТКМ. С ростом значений Pe число итераций USOR+GMRES(10) и ПТКМ+GMRES(10) значительно растет, тогда как число итераций ДКМ+GMRES(10) сокращается. С ростом значений Pe время CPU, требуемое методами USOR+GMRES(10) и ПТКМ+GMRES(10) сильно увеличивается, тогда как время счета, требуемое ДКМ+GMRES(10), остается практически неизменным. Таким образом, ДКМ-предобусловливание GMRES особенно актуально при решении сильно несимметричных задач с большими значениями Pe .

Таблица 1. IT и CPU для метода ДКМ(USOR, ПТКМ)+GMRES(10)

| $v_1(x, y)$ | $v_2(x, y)$ | Pe | GMRES(10) | | PGMRES(10) | | | | | |
|----------------|------------------------|--------|-----------|-------|------------|-------|------|-------|-----|-------|
| | | | IT | CPU | USOR | | ПТКМ | | ДКМ | |
| | | | | | IT | CPU | IT | CPU | IT | CPU |
| $x + y$ | $x - y$ | 10^3 | 32 | 0.89 | 9 | 0.054 | 10 | 0.057 | 7 | 0.041 |
| | | 10^4 | 171 | 3.81 | 22 | 0.41 | 25 | 0.45 | 5 | 0.036 |
| | | 10^5 | 1255 | 15.43 | 156 | 1.19 | 162 | 1.24 | 4 | 0.037 |
| $\sin(2\pi x)$ | $-2\pi y \cos(2\pi x)$ | 10^3 | 30 | 0.87 | 10 | 0.056 | 11 | 0.061 | 8 | 0.044 |
| | | 10^4 | 221 | 4.08 | 38 | 0.97 | 42 | 0.99 | 6 | 0.041 |
| | | 10^5 | 1540 | 19.67 | 334 | 3.38 | 342 | 3.50 | 5 | 0.043 |

Для решения СЛАУ с седловой матрицей использована задача из [14]. Рассматривались две версии GSTS-предобусловливателя: GSTS(1) и GSTS(2), отличающиеся выбором матрицы B_2 (табл. 2), и проводилось их сравнение с GSOR [17]. Во всех расчетах $B_1 = \widetilde{M}$. Значения параметров определялись экспериментально, причем $\omega_1 = \omega_2 = \omega_{\text{exp}}$.

Таблица 2. Выбор матрицы B_2

| Предобусловливатель | Матрица B_2 | Описание |
|---------------------|------------------------|---------------------------------------------------------------|
| GSTS(1) | $E\widehat{M}^{-1}E^T$ | $\widehat{M} = \text{tridiag}(\widetilde{M})$ |
| GSTS(2) | $E\widehat{M}^{-1}E^T$ | $\widehat{M} = \text{tridiag}(M) + \gamma \text{diag}(E^T E)$ |

Пример 2. Матрица исходной СЛАУ строится следующим образом. Матрица $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$ есть блочно-диагональная матрица, состоящая из n пятидиагональных блоков размером 50×50 ($n = 10l$, $l = 1, \dots, 6$), ненулевые элементы которых являются нормально распределенными случайными числами. Каждый пятидиагональный блок M_i , $i = 1, \dots, n$, имеет дефект, равный 1, и получается заменой $M_i \leftarrow M_i - \lambda_{\min}(M_i)I$ после заполнения. Матрица M является полуопределенной и $\text{rank}(M) = 49n$. Случайная матрица $E \in \mathbb{R}^{q \times p}$ имеет размер $500 \times 500l$ и состоит из l трехдиагональных блоков E_i ($i = 1, \dots, l$) размером 500×500 , объединенных вместе. Выбор параметра для Лагранжевой системы: $\gamma = \|M\|_2 / \|E\|_2^2$. В [14] задача решалась для случая $l = 5$.

Результаты численных тестов для GMRES и предобусловленного метода PGMRES даны в табл. 3. Норма вектора невязки (RES) оценивалась по формуле:

$$\text{RES} := \sqrt{\|f - Mu^{(k)} - E^T \mu^{(k)}\|_2^2 + \|g - Eu^{(k)}\|_2^2},$$

где $(u^{(k)T}, \mu^{(k)T})^T$ — полученное приближенное решение. Вектор правой части $(f^T, g^T)^T \in \mathbb{R}^{p+q}$ выбирался так, чтобы точным решением СЛАУ являлся вектор

$((u^*)^\top, (\mu^*)^\top)^\top = (1, 1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^{p+q}$. В качестве начального приближения использовался нулевой вектор, и итерации прекращались при выполнении условия $\text{RES} \leq 10^{-7}$. Вычисления проводились в MATLAB с машинной точностью 10^{-16} .

Все тестируемые методы, используемые как предобуславливатели, позволили значительно сократить число итераций и время счета GMRES. Преимущество имел GSTS(2), что связано с наиболее удачным выбором матрицы B_2 . Без использования предобуславливателей GMRES сходится медленно.

Таблица 3. IT и CPU для метода GSTS(1)(GSTS(2),GSOR)+GMRES

| p | q | $p+q$ | γ | GMRES | | PGMRES | | | | | |
|------|-----|-------|----------|-------|--------|---------|-------|---------|-------|------|-------|
| | | | | IT | CPU | GSTS(1) | | GSTS(2) | | GSOR | |
| | | | | | | IT | CPU | IT | CPU | IT | CPU |
| 500 | 500 | 1000 | 1.8E-01 | 256 | 49.01 | 36 | 17.21 | 25 | 12.53 | 35 | 17.01 |
| 1000 | 500 | 1500 | 1.6E-01 | 348 | 58.98 | 51 | 28.81 | 40 | 18.64 | 51 | 22.55 |
| 1500 | 500 | 2000 | 1.1E-01 | 417 | 77.76 | 52 | 35.52 | 42 | 28.05 | 54 | 31.48 |
| 2000 | 500 | 2500 | 3.5E-01 | 653 | 104.07 | 57 | 40.01 | 43 | 34.41 | 55 | 37.98 |
| 2500 | 500 | 3000 | 2.9E-02 | 869 | 137.54 | 69 | 46.54 | 51 | 38.64 | 59 | 44.03 |
| 3000 | 500 | 3500 | 2.5E-02 | 1189 | 175.12 | 74 | 54.81 | 56 | 43.96 | 68 | 48.73 |

Литература

1. **Benzi M., Golub G.H., and Liesen J.** Numerical solution of saddle point problems // Acta Numerica. — 2005. — Vol. 14. — P. 1–137.
2. **Быченков Ю.В., Чижонков Е.В.** Итерационные методы решения седловых задач. — М.: БИНОМ, 2010.
3. **Крукиер Л.А.** Неявные разностные схемы и итерационный метод их решения для одного класса систем квазилинейных уравнений // Изв. ВУЗов. Матем. — 1979. — Т. 7. — С. 41–52.
4. **Крукиер Л.А.** Кососимметричные итерационные методы решения стационарного уравнения конвекции–диффузии с малым параметром при старшей производной // Изв. ВУЗов. Матем. — 1997. — Т. 4. — С. 74–85.
5. **Krukier L.A.** Convergence acceleration of triangular iterative methods based on the skew-symmetric part of the matrix // Appl. Numer. Mathem. — 1999. — Vol. 30. — P. 281–290.
6. **Бочев М.А., Крукиер Л.А.** Об итерационном решении сильно несимметричных систем линейных алгебраических уравнений // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1997. — Т. 31, № 11. — С. 1283–1293.
7. **Chikina L.G., Krukier B.L.** Solution of linear equation systems with a dominant skew-symmetric part using the product triangular iterative method // Comput. Methods in Appl. Mathem. — 2003. — Vol. 3, № 4. — P. 647–650.
8. **Бай З.З., Крукиер Л.А., Мартынова Т.С.** Двухшаговые итерационные методы решения стационарного уравнения конвекции–диффузии с малым параметром при старшей производной на равномерной сетке // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2006. — Т. 46, № 2. — С. 295–306.
9. **Krukier L.A., Martinova T.S., and Bai Z.-Z.** Product-type skew-Hermitian triangular splitting iteration methods for strongly non-Hermitian positive definite linear systems // J. of Comput. and Appl. Mathem. — 2009. — Vol. 232, № 1. — P. 3–16.
10. **Krukier L.A., Krukier B.L., and Ren Z.-R.** Generalized skew-Hermitian triangular splitting iteration methods for saddle-point linear systems // Numer. Linear Algebra Appl. — 2014. — Vol. 21. — P. 152–170.

11. **Saad Y.** Iterative Methods for Sparse Linear Systems. — PWS Publishing Company, 1995.
12. **Bai Z.-Z., Golub G.H., and Pan J.-Y.** Preconditioned Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for non-Hermitian positive semidefinite linear systems // Numerische Mathematik. — 2004. — Vol. 98. — P. 1–32.
13. **Benzi M., Golub G.H.** A preconditioner for generalized saddle point problems // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2004. — Vol. 26. — P. 20–41.
14. **Golub G.H., Greif C.** On solving block-structured indefinite linear systems // SIAM J. on Scientific Computing. — 2003. — Vol. 24 — P. 2076–2092.
15. **Bai Z.-Z., Sun J., and Wang D.** A unified framework for the construction of various matrix multisplitting iterative methods for large sparse system of linear equations // Comp. Math. Appl. — 1996. — Vol. 32, № 12. — P. 51–76.
16. **Самарский А.А., Вабищевич П.Н.** Численные методы решения задач конвекции–диффузии. — М.: Эдиториал УРСС, 1999.
17. **Bai Z.-Z., Parlett B.N., and Wang Z.-Q.** On generalized successive overrelaxation methods for augmented linear systems // Numerische Mathematik. — 2005. — Vol. 102. — P. 1–38.

*Поступила в редакцию 23 октября 2015 г.,
в окончательном варианте 14 декабря 2015 г.*

Литература в транслитерации

1. **Benzi M., Golub G.H., and Liesen J.** Numerical solution of saddle point problems // Acta Numerica. — 2005. — Vol. 14. — P. 1–137.
2. **Bychenkov Yu.V., Chizhonkov E.V.** Iteratsionnye metody resheniya sedlovykh zadach. — М.: BINOM, 2010.
3. **Krukier L.A.** Neyavnye raznostnye skhemy i iteratsionnyy metod ikh resheniya dlya odnogo klassa sistem kvazilineynykh uravneniy // Izv. VUZov. Matem. — 1979. — Т. 7. — S. 41–52.
4. **Krukier L.A.** Kososimmetrichnye iteratsionnye metody resheniya statsionarnogo uravneniya konveksii–diffuzii s malym parametrom pri starshey proizvodnoy // Izv. VUZov. Matem. — 1997. — Т. 4. — S. 74–85.
5. **Krukier L.A.** Convergence acceleration of triangular iterative methods based on the skew-symmetric part of the matrix // Appl. Numer. Mathem. — 1999. — Vol. 30. — P. 281–290.
6. **Bochev M.A., Krukier L.A.** Ob iteratsionnom reshenii sil'no nesimmetrichnykh sistem lineynykh algebraicheskikh uravneniy // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1997. — Т. 31, № 11. — S. 1283–1293.
7. **Chikina L.G., Krukier B.L.** Solution of linear equation systems with a dominant skew-symmetric part using the product triangular iterative method // Comput. Methods in Appl. Mathem. — 2003. — Vol. 3, № 4. — P. 647–650.
8. **Bai Z.Z., Krukier L.A., Martynova T.S.** Dvukhshagovye iteratsionnye metody resheniya statsionarnogo uravneniya konveksii–diffuzii s malym parametrom pri starshey proizvodnoy na ravnomernoy setke // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2006. — Т. 46, № 2. — S. 295–306.
9. **Krukier L.A., Martinova T.S., and Bai Z.-Z.** Product-type skew-Hermitian triangular splitting iteration methods for strongly non-Hermitian positive definite linear systems // J. of Comput. and Appl. Mathem. — 2009. — Vol. 232, № 1. — P. 3–16.
10. **Krukier L.A., Krukier B.L., and Ren Z.-R.** Generalized skew-Hermitian triangular splitting iteration methods for saddle-point linear systems // Numer. Linear Algebra Appl. — 2014. — Vol. 21. — P. 152–170.

11. **Saad Y.** Iterative Methods for Sparse Linear Systems. — PWS Publishing Company, 1995.
12. **Bai Z.-Z., Golub G.H., and Pan J.-Y.** Preconditioned Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for non-Hermitian positive semidefinite linear systems // Numerische Mathematik. — 2004. — Vol. 98. — P. 1–32.
13. **Benzi M., Golub G.H.** A preconditioner for generalized saddle point problems // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2004. — Vol. 26. — P. 20–41.
14. **Golub G.H., Greif C.** On solving block-structured indefinite linear systems // SIAM J. on Scientific Computing. — 2003. — Vol. 24 — P. 2076–2092.
15. **Bai Z.-Z., Sun J., and Wang D.** A unified framework for the construction of various matrix multisplitting iterative methods for large sparse system of linear equations // Comp. Math. Appl. — 1996. — Vol. 32, № 12. — P. 51–76.
16. **Samarskiy A.A., Vabishchevich P.N.** Chislennyye metody resheniya zadach konveksii-dif-fuzii. — M.: Editorial URSS, 1999.
17. **Bai Z.-Z., Parlett B.N., and Wang Z.-Q.** On generalized successive overrelaxation methods for augmented linear systems // Numerische Mathematik. — 2005. — Vol. 102. — P. 1–38.

