
О ПАРАМЕТРИЧЕСКОМ ПРЕДОБУСЛОВЛИВАНИИ РЯДАМИ НЕЙМАНА МЕТОДА СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ

Т.Р. Шарипов А.С. Галкин

АБСТРАКТ. Для ускорения сходимости метода сопряженных градиентов при решении симметричных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) рассматривается параметрическое m -шаговое предобусловливание рядами Неймана. Для нечетных m предложен новый выбор соответствующего стационарного параметра на основе спектральных границ матрицы СЛАУ. При различных m анализируется вычислительная эффективность такой параметризации по сравнению с диагональным масштабированием исходной системы. На примере численного решения двумерного уравнения Пуассона с использованием стандартного пятиточечного разностного шаблона показано, что оптимальным значением m является 1, при котором число итераций метода сопряженных градиентов сокращается минимум в 2 раза, а расчетное время сокращается минимум на 20%.

Keywords: conjugate gradient method, parametric polynomial preconditioning, Poisson's equation.

ВВЕДЕНИЕ

Для решения невырожденной симметричной СЛАУ размерности $N \times N$

$$(1) \quad Ax = f$$

рассматривается предобусловленный метод сопряженных градиентов (МСГ) [1]:

$$\begin{aligned} r_0 &= b - Ax_0, \quad z_0 = B_0^{-1}r_0, \quad p_0 = z_0, \quad s_0 = (r_0, z_0); \\ 1) \quad \alpha_n &= \rho_n / (Ap_n, p_n); \\ 2) \quad x_{n+1} &= x_n + \alpha_n p_n; \\ 3) \quad r_{n+1} &= r_n - \alpha_n Ap_n; \\ 4) \quad z_{n+1} &= B_{n+1}^{-1}r_{n+1}; \\ 5) \quad s_{n+1} &= (r_{n+1}, z_{n+1}); \\ 6) \quad \beta_n &= s_{n+1}/s_n; \\ 7) \quad p_{n+1} &= z_{n+1} + \beta_n p_n; \\ n &= 0, 1, \dots \end{aligned}$$

SHARIPOV T.R., GALKIN A.S., ON SOME PARAMETRIC POLYNOMIAL PRECONDITIONING OF CONJUGATE GRADIENT METHOD.

© 2014 Т.Р. Шарипов, А.С. Галкин.

Среди предобусловливателей B_n , эффективных при распараллеливании вычислений [2], отдельную группу методов составляют полиномиальные предобусловливатели вида

$$B_n^{-1} = P_m(A),$$

где P_m есть некоторый полином степени m , известная структура которого позволяет вычислять вектор поправки $B_n^{-1}r_n$ в итерационном процессе МСГ. Например, методы полиномов Чебышева и наименьших квадратов формируют $P_m(A)$ из условия минимизации функционала $\|I - P_m(A)A\|$ (I – единичная матрица), тогда как в настоящей работе рассматривается подгруппа методов, использующая усеченные ряды Неймана для приближенного обращения матрицы A . Здесь, для некоторого числового параметра ω и некоторого заданного обратимого приближения B_{n-1} записываются элементарные соотношения [1] (гл. 12.3)

$$\begin{aligned}\omega A &= B_{n-1} - (B_{n-1} - \omega A) = [I - (I - \omega AB_{n-1}^{-1})] B_{n-1}, \\ \omega A^{-1} &= B_{n-1}^{-1} [I - (I - \omega AB_{n-1}^{-1})]^{-1}\end{aligned}$$

приводящие, после обозначения

$$(2) \quad N_{n-1} = I - \omega AB_{n-1}^{-1},$$

к равенству

$$\omega A^{-1} = B_{n-1}^{-1} (I - N_{n-1})^{-1}.$$

Далее, при условии $\|N_{n-1}\| \leq 1$, в силу леммы Неймана [3] (лемма 3.1) получают сходящийся ряд

$$\omega A^{-1} = B_{n-1}^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} N_{n-1}^k,$$

усечение которого до степени m используется для пересчета предобусловливателя B_n :

$$(3) \quad B_n^{-1} = B_{n-1}^{-1} \sum_{k=0}^m N_{n-1}^k, \quad m = 1, 2, \dots$$

Замечание 1. Проведение n итераций по схеме (3) рекуррентно сводится к

$$(4) \quad B_n^{-1} = B_0^{-1} \sum_{k=0}^{(m+1)^n - 1} N_0^k, \quad m = 1, 2, \dots$$

Доказательство. Справедливость (4) при $n = 1$ проверяется непосредственно. Далее, предполагая его верность для некоторого n , с учетом легко устанавливаемого тождества для любого натурального $1 \leq p \leq n$

$$N_p = N_0^{(m+1)^p},$$

по индукции имеем

$$\begin{aligned}B_{n+1}^{-1} &= B_n^{-1} \sum_{i=0}^m N_n^i = B_n^{-1} \sum_{i=0}^m N_0^{i(m+1)^n} = B_0^{-1} \sum_{k=0}^{(m+1)^{n+1} - 1} N_0^k \sum_{i=0}^m N_0^{i(m+1)^n} \\ &= B_0^{-1} \sum_{k=0}^{(m+1)^{n+1} - 1} \sum_{i=0}^m N_0^{k+i(m+1)^n} = B_0^{-1} \sum_{k=0}^{(m+1)^{n+1} - 1} N_0^k.\end{aligned}$$

□

С учетом замечания 1, всюду далее будем предполагать, что матрица B_0 задана, а пересчет предобусловливателя осуществляется по формуле

$$(5) \quad B_n^{-1} = B_0^{-1} \sum_{k=0}^m N_0^k, \quad m = 1, 2, \dots,$$

то есть рассматривается стационарное, по отношению к номеру итерации n , предобусловливание. Предполагается также вычисление вектора поправки $B_n^{-1}r_n$ вместо самой матрицы B_n^{-1} как в близких по тематике работах [4], [5], которые применяют специальные приемы компенсации дорогостоящих операций умножения матриц при вычислении N_n .

В первой части работы рассматриваются известные способы выбора параметра ω , оптимизирующие скорость сходимости МСГ. Показано, что если

$$(6) \quad \omega = \frac{2}{\lambda_{\min}(AB_0^{-1}) + \lambda_{\max}(AB_0^{-1})},$$

где $\lambda_{\min}, \lambda_{\max}$ – минимальное и максимальное собственные числа, то для нечетных значений m нижняя граница для числа обусловленности матрицы AB_n^{-1} равна 1. Вторая часть посвящена вопросам оценки оптимального значения m , при котором дополнительные вычислительные расходы на суммирование ряда (5) не приведут к увеличению общего расчетного времени. В заключительной части на примере решения двумерной задачи Дирихле для уравнения Пуассона демонстрируется эффективность предложенной параметризации.

1. ВЫБОР ПАРАМЕТРА ω

Случай $\omega = 1$ соответствует методу Ньютона-Хотеллинга-Шульца¹, обеспечивающему $(m+1)$ -й порядок сходимости последовательности B_n^{-1} к A^{-1} [3] [теорема 3.11] и используется для быстрого обращения матрицы A [5], [6].

Эмпирическая зависимость $\omega = 4/(3\lambda_{\max}(AB_0^{-1}))$ предложена в работе [7] и исчерпывает, насколько известно авторам, описанные в литературе отличные от $\omega = 1$ варианты стационарных параметризаций.

В силу хорошо известной оценки $\text{cond}(AB_n^{-1}) \geq |\lambda_{\max}(AB_n^{-1})|/|\lambda_{\min}(AB_n^{-1})|$ параметр ω будем выбирать из условия

$$(7) \quad |\lambda_{\max}(AB_n^{-1})| = |\lambda_{\min}(AB_n^{-1})|.$$

Используя непосредственно следующие из (2) и (5) тождества

$$\begin{aligned} AB_n^{-1} &= AB_0^{-1}(I + N_0 + \dots + N_0^m) \\ &= \frac{1}{\omega}(I - N_0)(I + N_0 + \dots + N_0^m) = \frac{1}{\omega}(I - N_0^{m+1}), \end{aligned}$$

при нечетных m получаем

$$\begin{aligned} \lambda_{\max}(AB_n^{-1}) &= \frac{1}{\omega} (1 - \min|\lambda_i(N_0)|^{m+1}), \\ \lambda_{\min}(AB_n^{-1}) &= \frac{1}{\omega} (1 - \max|\lambda_i(N_0)|^{m+1}), \end{aligned}$$

где $\lambda_i(N_0) = 1 - \omega\lambda_i(AB_0^{-1})$, $i = 1 \dots N$.

Легко видеть, что если матрица AB_0^{-1} положительно определена, то

$$\begin{aligned} \max|\lambda_i(N_0)| &= |1 - \omega\lambda_{\max}(AB_0^{-1})|, \\ \min|\lambda_i(N_0)| &= |1 - \omega\lambda_{\min}(AB_0^{-1})|, \end{aligned}$$

а соотношение (7) сводится к уравнению

$$|1 - \omega\lambda_{\min}(AB_0^{-1})| = |1 - \omega\lambda_{\max}(AB_0^{-1})|,$$

которое разрешимо относительно $\omega \neq 0$ только при условии

$$1 - \omega\lambda_{\min}(AB_0^{-1}) = -(1 - \omega\lambda_{\max}(AB_0^{-1})),$$

откуда находим, что ω вычисляется по формуле (6).

Согласно теореме 3.4.2 [2], если m нечетно, B_n из (5) положительно определена когда положительно определена матрица B_0 , поэтому справедлива

¹В работе [6] метод носит название The Shulz-Jones-Mayer (SJM).

Теорема 1. Пусть A и B_0 – симметричные положительно определенные матрицы, тогда при ω , вычисляемом по формуле (6), матрица B_n из (5) также положительно определена, причем $\lambda_{\max}(AB_n^{-1}) = -\lambda_{\min}(AB_n^{-1})$.

Формула (6) предполагает, что известны экстремальные собственные значения матрицы AB_0^{-1} , поэтому, в качестве B_0 ожидаемо использование либо единичной матрицы I , либо $\text{diag}(A)$ в случае, если эта диагональ имеет постоянные значения.

2. Анализ вычислительной эффективности

Пусть МСГ с предобуславливателем из (5) сходится за $n(\omega, m)$ итераций, тогда как при $B_n \equiv \text{diag}(A)$ соответствующее число итераций составляет n_0 . Поскольку количество вычислений на каждой итерации первого метода $C(m)$ превышает соответствующий показатель второго C_0 , то для итоговой эффективности предлагаемого полиномиального предобуславливателя должно выполняться условие $n(\omega, m) C(m) < n_0 C_0$, откуда получаем верхнюю оценку на $n(\omega, m)$:

$$(8) \quad n(\omega, m) < n_0 \frac{C_0}{C(m)}.$$

Величины n_0 , $n(\omega, m)$ будем получать экспериментально в следующем разделе, а C_0 и $C(m)$ оценим из алгоритма МСГ. С учетом значащих операций МСГ без предобуславливания, т.е. при $B_n = I \forall n$, состоит из одного матрично-векторного произведения, двух скалярных произведений и трех векторных операций:

$$C_0 \approx N(d+5),$$

где d – это количество ненулевых диагоналей матрицы A (для плотной матрицы $d = N$).

При использовании предобуславливания нужно дополнительно вычислять m матрично-векторных произведений по формуле (5), поэтому

$$C(m) \approx C_0 + m N d$$

и оценка (8) принимает вид

$$(9) \quad n_0 > n(\omega, m) \frac{C(m)}{C_0} = n(\omega, m) \left(1 + m \frac{d}{d+5} \right).$$

3. Численный эксперимент

На единичном квадрате $[0, 1] \times [0, 1]$ решалась задача Дирихле для уравнения Пуассона

$$u_{xx} + u_{yy} = 4$$

с известным аналитическим решением

$$u(x, y) = x^2 + y^2.$$

Использовалась стандартная пятиточечная разностная схема [8] с равномерным шагом $h = 1/(N_h + 1)$, где N_h – число внутренних узлов сетки. Наименьшее и наибольшее собственные значения соответствующей матрицы A размерности $N \times N$ ($N = N_h^2$) вычисляются по известным формулам

$$\lambda_{\min} = \frac{8}{h^2} \sin \frac{\pi h}{2}, \lambda_{\max} = \frac{8}{h^2} \cos \frac{\pi h}{2},$$

следовательно, по формуле (6) получаем $\omega = h^2/4$ при $B_0 = I$ и $\omega = 1$ при $B_0 = \text{diag}(A)$.

Система (1) решалась на последовательности сеток $N_h \times N_h = 32 \times 32, 64 \times 64, 128 \times 128, 256 \times 256, 512 \times 512$, где в качестве вектора начальных приближений использовано $x_0 = 0$. Итерации МСГ продолжались до тех пор, пока евклидова сеточная норма невязки $\|r_{n+1}\|_2 \geq 10^{-6}$.

В таблице 1 приведено число итераций МСГ с выбором $B_0 = I$ при различных значениях m и рассчитанным $\omega = h^2/4$. Колонка $B_n = \text{diag}(A)$ соответствует случаю $m = 0$, то есть диагональному предобусловливанию. Кратное уменьшение числа итераций представлено на рисунке 1.

Стоит отметить, что несмотря на монотонное уменьшение числа итераций с ростом m , необходимо сравнить затрачиваемые при этом расчетные времена. Оценки по формуле (9) (для рассматриваемой задачи $d = 5$) с привлечением данных таблицы 1 показывают, что применение предложенного параметрического предобусловливателя эффективно на всех сетках вплоть до значения $m = 3$, что подтверждают и реальные замеры времени, приведенные в таблице 2. Оптимальным же значением является $m = 1$, при котором достигается максимальное уменьшение расчетного времени. В таблице 3 для $m = 1$ представлено сравнение числа итераций при различных значениях ω , описанных во второй части настоящей работы.

Сетка	$B_n = \text{diag}(A)$	$m = 1$	$m = 3$	$m = 5$	$m = 7$	$m = 9$
32×32	81	44	31	25	21	19
64×64	160	80	57	46	40	36
128×128	315	157	111	90	78	70
256×256	621	309	218	178	153	137
512×512	1225	609	429	350	303	270

ТАБЛИЦА 1. Число итераций n_0 и $n(\omega, m)$ предобусловленного МСГ

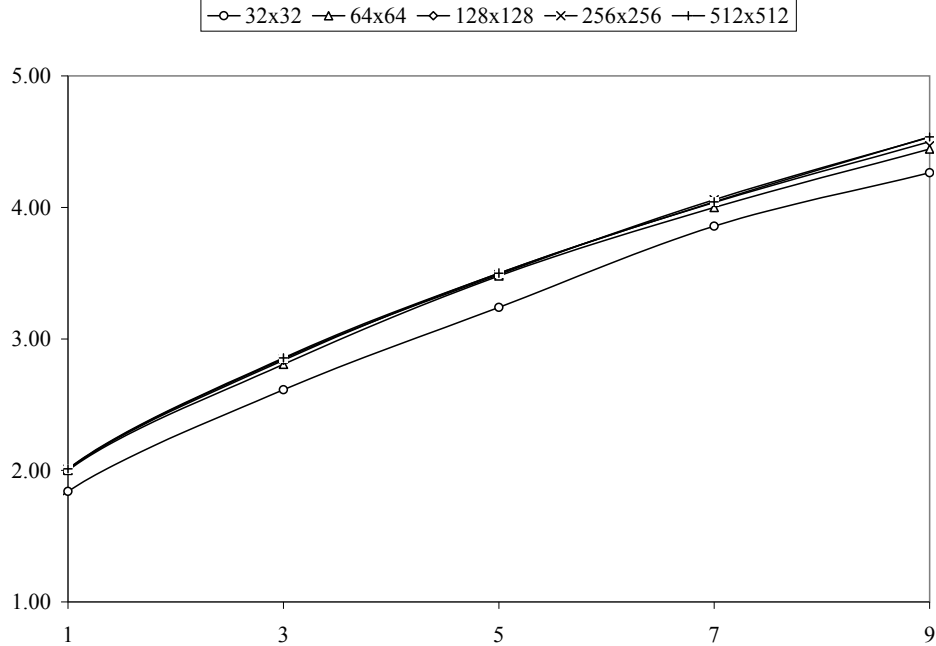


Рис. 1. Величина $n_0/n(\omega, m)$ при различных m

Сетка	$m = 1$	$m = 3$	$m = 5$	$m = 7$	$m = 9$
32×32	-50%	0%	0	0	50%
64×64	-31.2%	-12.5%	-6.25%	6.25%	25%
128×128	-24.8%	-5.7%	1.9%	12.4%	25.7%
256×256	-21.7%	-11.7%	2.2%	9.1%	19.4%
512×512	-22.6%	-14%	-3.8	6.4	14.8%

ТАБЛИЦА 2. Процентное уменьшение/увеличение (в зависимости от знака) расчетного времени при различных m относительно диагонального предобуславливания

Сетка	По формуле (6)	$\omega = 4/(3\lambda_{\max}(AB_0^{-1}))$	$\omega = 1$
32×32	44	50	57
64×64	80	98	113
128×128	157	193	228
256×256	309	379	463
512×512	609	748	947

ТАБЛИЦА 3. Число итераций $n(\omega, 1)$ при различных ω

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Saad Y., *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWS Publ., New York, 2000.
- [2] Ортега Дж., *Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем*, Мир, Москва, 1991, 367 с.
- [3] Вержбицкий В.М., *Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения*, М.: Высш. школа, 2000, 267 с.
- [4] Вшивков В.А., Засыпкина О.А., *Итерационный метод решения СЛАУ первого порядка сходимости с регулируемой матрицей перехода*, Сибирский журнал индустриальной математики, 2008, Том XI, №2 (34).
- [5] Оселедец И.В., Тыртышников Е.Е., *Приближенное обращение матриц при решении гиперсингулярного интегрального уравнения*, ЖВМ и МФ, 2005, Том 45, №2, с. 315–326.
- [6] Crandall R., Klivington J., *Fast matrix algebra on Apple G4*, Apple Computer, Advanced Computation Group, 2000.
- [7] Lois Mansfield, *Damped Jacobi preconditioning and coarse grid deflation for conjugate gradient iteration on parallel computers*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, V12, Issue 6, 1991, p. 1314–1323.
- [8] Самарский А.А., Николаев Е.С., *Методы решения сеточных уравнений*, Наука, Москва, 1978, 592 с.

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ,
 УНИВЕРСИТЕТСКАЯ НАБ. 7-9,
 199034, САНКТ-ПЕТЕРБУРГ, РОССИЯ
E-mail address: sharipovtr@gmail.com