ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ, 2020, том 495, с. 38–43

МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

О МЕТОДАХ МОМЕНТОВ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА

 В. П. Ильин[1,2,*]

Представлено академиком РАН Е.Е. Тыртышниковым 18.05.2020 г.
Поступило 02.06.2020 г.
После доработки 02.06.2020 г.
Принято к публикации 11.11.2020 г.

Рассматриваются методы моментов в подпространствах Крылова для решения симметричных систем линейных алгебраических уравнений. Предложено семейство итерационных алгоритмов, основанное на обобщенной ортогонализации Ланцоша с выбором исходного вектора v^0 независимо от начальной невязки. Данный подход позволяет на одном наборе базисных векторов экономично решать серии систем линейных алгебраических уравнений с одинаковой матрицей, но разными правыми частями, а также реализовывать обобщенные методы моментов, сводящиеся к блочным крыловским алгоритмам с использованием совокупности линейно независимых исходных векторов $v_1^0, \ldots, v_m^0$. Повышение производительности реализаций алгоритмов достигается за счет сокращения числа матричных умножений и эффективного распараллеливания векторных операций. Показана возможность расширения применимости методов моментов с использованием предобусловливания на различные классы алгебраических систем: знакопеременных, несовместных, несимметричных и комплексных, в том числе неэрмитовых.

Ключевые слова: методы моментов, подпространства Крылова, параметрическая ортогонализация Ланцоша, алгоритмы сопряженных направлений

DOI: 10.31857/S2686954320060223

В 1958 г. ленинградский математик Ю.В. Воробьёв опубликовал книгу о методах моментов в пространствах Галёркина [1], связанных со многими проблемами теории операторов и прикладной математики [2]. Следствием изложенных им результатов явилось обобщение метода сопряженных градиентов для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), предложенного в работах К. Ланцоша, М. Хестенеса и Е. Штифеля, см. монографии [3–6]. В частности, Ю.В. Воробьёвым построены экономичные алгоритмы для решения СЛАУ со знакопеременным спектром и разными правыми частями, но с одинаковой матрицей. В 2013 г. авторы книги [3] исследовали и применили методы моментов для решения комплексных СЛАУ, а также для редукции моделей многомасштабных динамических систем.

Целью данной работы является развитие метода моментов в подпространствах Крылова с обобщением на алгоритмы сопряженных направлений [5], а также на предобусловленные итерационные процессы для решения вещественных СЛАУ. Рассмотренные алгоритмы несложно переносятся на комплексные эрмитовы системы.

1. ПОЛИНОМИАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ СЛАУ

Рассмотрим симметричную положительно определенную (с.п.о.) СЛАУ в виде

$$Au = f, \quad A = A^\top = \mathcal{R}^{N,N}, \quad u, f \in \mathcal{R}^N, \qquad (1)$$

где для векторов введено евклидово параметризованное скалярное произведение

$$(u, v)_\gamma \equiv (A^\gamma u, v) = u^\top \cdot A^\gamma v, \; (u, u)_\gamma = \|u\|_\gamma^2,$$

причем γ равно 0, или 1, или 2.

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия*
[2] *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*
**E-mail: ilin@sscc.ru*

Пусть для произвольного вектора v^0 совокупность линейно независимых векторов $v^{k+1} = Av^k$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$, образует n-мерное подпространство Крылова

$$\mathcal{K}_n(v^0, A) = \mathrm{Span}\{v^0, v^1, \ldots, v^{n-1}\}, \quad (2)$$

так что элемент $E_n v^n = Av^{n-1}$ есть проекция v^n в подпространство $\mathcal{K}_n$, а E_n — соответствующий оператор проектирования в смысле введенного скалярного произведения $(\cdot, \cdot)_\gamma$.

Сформулируем следующую проблему моментов: по заданному набору $n + 1$ линейно независимых элементов $v^0, v^1, \ldots, v^n$ из гильбертова пространства $\mathcal{R}^N$ построить линейный оператор A_n, определенный в n-мерном подпространстве $\mathcal{K}_n$, удовлетворяющий условиям:

$$\begin{gathered} v^1 = A_n v^0, \ldots, v^{n-1} = A_n v^{n-2}, \\ E_n v^n = A_n v^{n-1} = A_n^n v^0. \end{gathered} \quad (3)$$

Поскольку $E_n v^n$ есть проекция элемента $v^n \in \mathcal{R}^N$ в подпространство $\mathcal{K}_n$, то разность $v^n - E_n v^n$ ортогональна любому элементу $v^k \in \mathcal{K}_n$. Отсюда, используя представление

$$E_n v^n = -a_0 v^0 - a_1 v^1 - \ldots - a_{n-1} v^{n-1},$$

после скалярного умножения обеих его частей на $A^\gamma v^k$, для вектора коэффициентов $a = (a_0, \ldots, a_{n-1})^\top$ получаем систему

$$Ga = w \equiv ((v^n, v^0)_\gamma, \ldots, (v^n, v^{n-1})_\gamma)^\top, \quad (4)$$

с невырожденной матрицей Грама $G = \{(v^k, v^l)_\gamma\} \in \mathcal{R}^{n,n}$. В силу этого СЛАУ (4) единственным образом определяет матричный многочлен n-й степени, аннулирующий элемент v^0:

$$P_n(A_n)v^0 = (A_n^n + a_{n-1}A_n^{n-1} + \ldots + a_0 I)v^0 = 0, \quad (5)$$

а корни соответствующего скалярного полинома $P_n(\lambda)$ являются собственными числами оператора A_n. Здесь и далее индекс γ у матриц, векторов и многочленов для краткости опускаем.

Рассмотрим теперь представление решения уравнения

$$A_n u^n = f^n; \quad u^n, f^n \in \mathcal{K}_n, \quad (6)$$

правая часть которого имеет вид

$$\begin{gathered} f^n = \sum_{k=0}^{n-1} b_k v^k = \sum_{k=0}^{n-1} b_k A_n^k v^0 = F_{n-1}(A_n)v^0, \\ F_{n-1}(\lambda) = b_{n-1}\lambda^{n-1} + b_{n-2}\lambda^{n-2} + \ldots + b_0. \end{gathered} \quad (7)$$

Умножая (7) скалярно на $v^0, \ldots, v^{n-1}$, формируем СЛАУ для вектора коэффициентов:

$$\begin{gathered} Gb = \overline{f} \equiv ((v^0 f)_\gamma, (v^1 f)_\gamma, \ldots, (v^{n-1}, f)_\gamma)^\top, \\ b = (b_0, b_1, \ldots, b_{n-1})^\top. \end{gathered} \quad (8)$$

Решение системы (6) может быть выражено с помощью многочлена

$$S_{n-1}(A_n) = A_n^{-1}\left[F_{n-1}(A_n) - P_n(A_n)F_{n-1}(0)/P_n(0)\right], \quad (9)$$

в результате чего при условии $P_n(0) = a_0 \neq 0$ приближенное решение проблемы моментов выражается с помощью коэффициентов многочленов a_k и b_k следующим образом:

$$\begin{gathered} u^n = S_{n-1}(A_n)v^0 = (b_1 - \overline{a}_1)v^0 + \ldots + \\ + (b_{n-1} - \overline{a}_{n-1})v^{n-2} - \overline{b}_0 v^{n-1}, \\ \overline{a}_k = a_k b_0/a_0, \quad \overline{b}_0 = b_0/a_0. \end{gathered} \quad (10)$$

2. РЕКУРСИВНОЕ РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ МОМЕНТОВ

Повышение экономичности алгоритма, представленного формулой (10), достигается путем ортогонализации векторов $v^0, v^1, \ldots, v^n$, предложенной К. Ланцошем и лежащей в основе метода сопряженных градиентов. Рассмотрим этот подход в обобщенной форме, приводящей к методам сопряженных направлений [5]. Более конкретно, применяем параметрическую A^γ-ортогонализацию, т.е. строим совокупность векторов p^k, обладающих свойствами $(p^k, p^l)_\gamma = (p^k, p^k)_\gamma \cdot \delta_{k,l}$, где $\gamma = 0, 1, 2$, а $\delta_{k,l}$ — символ Кронекера. Сами формулы имеют вид

$$\begin{gathered} p^0 = v^0, \quad p^1 = Av^0 - \overline{\alpha}_0^{(\gamma)} v^0; \quad k = 1, 2, \ldots: \\ p^{k+1} = (A - \overline{\alpha}_k^{(\gamma)} I)p^k - \overline{\beta}_k^{(\gamma)} p^{k-1}, \\ \overline{\alpha}_k^{(\gamma)} = (p^k, p^k)_{\gamma+1}/\|p^k\|_\gamma^2, \quad \overline{\beta}_k^{(\gamma)} = \|p^k\|_\gamma^2/\|p^{k-1}\|_\gamma^2. \end{gathered} \quad (11)$$

При этом векторы p^k выражаются через матричные многочлены, связанные между собой трехчленными соотношениями:

$$\begin{gathered} p^k = P_k(A)v^0, \quad \beta_{-1}^{(\gamma)} = 0, \quad P_0(A) = 1, \\ P_{k+1}(A) = (A - \overline{\alpha}_k^{(\gamma)} I)P_k(A) - \overline{\beta}_k^{(\gamma)} P_{k-1}(A). \end{gathered} \quad (12)$$

Поскольку векторы $p^0, \dots, p^{n-1}$ образуют A^γ-ортогональный базис в $\mathcal{K}_n$, в силу свойств оператора проектирования E_n и рекурсий (12) имеем

$$P_n(A_n)v^0 = E_n P_n(A)v^0 = E_n p^n = 0.$$

Отсюда следует, что полученные полиномы P_n совпадают с многочленами из (5), корни уравнения $P_n(\lambda) = 0$ являются собственными числами оператора A_n, а в ортогональном базисе $p^0, \dots, p^{n-1}$ оператор проектирования из $\mathcal{R}^N$ в $\mathcal{K}_n$ является ортогональным проектором, т.е.

$$E_n = V_n V_n^\top, \quad E_n^2 = E_n, \quad V_n \in \mathcal{R}^{N,n},$$

где V_n есть матрица, столбцы которой составлены из векторов p^k.

З а м е ч а н и е 1. В работе [7] было предложено другое обобщение ортогонализации Ланцоша:

$$p^0 = v^0, \quad c_1 p^1 = Bp^0 - \alpha_0 p^0, \quad k = 2, 3, \dots :$$

$$\begin{gathered} c_{k+1}p^{k+1} = Bp^k - \alpha_k p^k - \beta_k p^{k-1}, \\ \alpha_k = (p^k, CBp^k)/(p^k, Cp^k), \end{gathered} \tag{13}$$

$$\beta_k = (p^{k-1}, CBp^{k-1})/(p^{k-1}, Cp^{k-1}),$$

где B и C — некоторые перестановочные симметричные матрицы, а c_k — произвольные ненулевые константы. Данные соотношения обеспечивают C-ортогональность векторов, т.е. $(p^k, Cp^n) = 0$ при $k \neq n$. Формулы (12) следуют из (13) при $B = A$ и $C = A^\gamma$, а в [7] рассматривался более конкретно случай $B = AA^\top = C$ для несимметричных СЛАУ.

Используя рекуррентные свойства построенных многочленов, проведем преобразования приближенного решения u^n из (10). Вводя обозначение $R_n(\lambda) = P_n(\lambda)/P_n(0)$, для данных полиномов вследствие (12) получаем следующую рекурсию:

$$\begin{gathered} R_{k+1}(\lambda) = (\lambda - \bar{\alpha}_k^{(\gamma)})R_k(\lambda)\, P_k(0)/P_{k+1}(0) - \\ - \bar{\beta}_{k-1}^{(\gamma)}\, R_{k-1}(\lambda)P_{k-1}(0)/P_{k+1}(0). \end{gathered} \tag{14}$$

Отсюда с помощью обозначений

$$\begin{gathered} \alpha_k = -P_k(0)/P_{k+1}(0), \\ \beta_k = \beta_k^{(\gamma)} R_{k-1}(\lambda)\, P_{k-1}^2(0)/P_k^2(0), \\ Q_k(\lambda) = -[R_{k+1}(\lambda) - R_k(\lambda)]/\alpha_k\lambda, \end{gathered}$$

приходим к двучленным рекурсиям

$$\begin{gathered} R_{k+1}(\lambda) = R_k(\lambda) - \lambda\alpha_k Q_k(\lambda), \\ Q_{k+1}(\lambda) = R_{k+1}(\lambda) + \beta_k Q_k(\lambda). \end{gathered} \tag{15}$$

Вводя наряду с этими многочленами соответствующие элементы гильбертова пространства $r^k = R_k(A)v^0$, $q^k = Q_k(A)v^0$, получаем аналогичные векторные соотношения

$$\begin{gathered} r^{k+1} = r^k - \alpha_k Aq^k, \quad q^{k+1} = r^{k+1} + \beta_k q^k, \\ q^0 = r^0 = v^0. \end{gathered} \tag{16}$$

На основе свойств введенных выше полиномов приходим к следующим ортогональным свойствам полученных векторных последовательностей:

$$\begin{gathered} (r^k, r^{k'})_{\gamma-1} = \sigma_k \delta_{k,k'}, \quad \sigma_k = \|r^k\|_{\gamma-1}^2, \\ (q^k, q^{k'})_\gamma = \rho_k \delta_{k,k'}, \quad \rho_k = (q^k, q^k)_\gamma. \end{gathered} \tag{17}$$

Отсюда и из (16) получаем формулы для итерационных параметров:

$$\alpha_k = \sigma_k/\rho_k, \quad \beta_k = \sigma_{k+1}/\sigma_k. \tag{18}$$

Определим теперь выражение для приближенного решения (10). Так как элементы $r^0, \dots, r^{n-1}$ образуют в $\mathcal{K}_n$ ортогональный базис, мы можем записать:

$$f^n \equiv E_n f = F_{n-1}(A)v^0 = \sum_{k=0}^{n-1} r^k (f, r^k)_\gamma / \|r^k\|_\gamma^2.$$

Поскольку отсюда следует

$$\begin{gathered} F_n(0) = \sum_{k=0}^{n} (f, r^k)_\gamma R_k(0)/\|r^k\|_\gamma^2 = F_{n-1}(0) + f_n^n, \\ f_n^n = (f, r^n)_\gamma/\|r^n\|_\gamma^2, \end{gathered} \tag{19}$$

то из выражений (10), (16) получаем

$$\begin{gathered} u^{k+1} = A^{-1}[f^{k+1} - F_k(0)r^{k+1}] = \\ = A^{-1}[f^k - F_{k-1}(0)r^k + \alpha_k(F_{k-1}(0) + f_k^r)Aq^k] = \\ = u^k + \alpha_k \gamma_k q^k, \end{gathered}$$

где введено обозначение $\gamma_n = F_n(0)$. Таким образом, решение проблемы моментов определяется двучленными соотношениями

$$\begin{gathered} u^{k+1} = u^k + \alpha_k \gamma_k q^k, \quad \alpha_k = \|r^k\|_\gamma^2/(Aq^k, q^k)_\gamma, \\ r^{k+1} = r^k - \alpha_k Aq^k, \quad \gamma_k = \gamma_{k-1} + f_k^k, \\ q^{k+1} = r^{k+1} + \beta_k q^k, \quad \beta_k = \|r^{k+1}\|_\gamma^2/\|r^k\|_\gamma^2, \\ r^0 = q^0 = v^0, \quad \gamma_0 = (f, v^0)_\gamma^2/\|v^0\|_\gamma^2. \end{gathered} \tag{20}$$

Эти формулы упрощаются, если положить $v^0 = f$, поскольку при этом $\gamma_0 = \dots = \gamma_n = 1$. Полагая $v^0 = f - Au^0$ для произвольного начального вектора u^0, на любой n-й итерации имеем вектор невязки $r^n = f - Au^n$, т.е. приходим к методам сопряженных направлений [4, 5].

3. НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ИТЕРАЦИОННОГО МЕТОДА МОМЕНТОВ

Алгоритм (20) позволяет экономично решать такие актуальные задачи, как серии СЛАУ с одинаковой матрицей A, но разными правыми частями $f^{(m)}$, $m = 1, \ldots, M$, которые определяются последовательно, т.е. новый m-й вектор $f^{(m)}$ может быть вычислен только после решения предыдущей $(m-1)$-й системы. При этом первая СЛАУ решается по формулам (20), а последующие искомые векторы $u^{(m)}$ – с помощью уже найденных коэффициентов α_n и векторов q^n. Перевычислять надо только величины γ_n, что значительно сокращает объем арифметических операций, особенно ввиду отсутствия матрично-векторных умножений. Для приближенных решений u^n вместо (20) можно использовать их представление через векторы q^n, которые в силу свойств ортогональности (17) образуют базис в $\mathcal{K}_n$ и удовлетворяют соотношениям

$$\begin{gathered} A_n q^k = \alpha_k^{-1}[-\beta_{k-1}q^{k-1} + (1+\beta_k)q^k - q^{k+1}], \\ A_n q^0 = \alpha_0^{-1}[(1+\beta_0)q^0 - q^1], \\ A_n q^{n-1} = \alpha_{n-1}^{-1}[-\beta_{n-1}q^{n-2} + (1+\beta_{n-1})q^{n-1}]. \end{gathered} \tag{21}$$

Подставляя искомое представление решения

$$u^n = \sum_{k=0}^{n-1} \nu_k q^k = u^{n-1} + \nu_{n-1}q^{n-1}, \quad u^{-1} = 0, \tag{22}$$

в уравнение (6), с помощью соотношений (17) и (20) получаем следующее выражение:

$$\sum_{k=0}^{n-1} \nu_k \alpha_k^{-1}[-\beta_{k-1}q^{k-1} + (1+\beta_k)q^k - q^{k+1}] = \sum_{k=0}^{n-1} f_k q^k,$$
$$f_k = (f, q_k)_\gamma / \|q_k\|_\gamma^2.$$

Приравнивая коэффициенты при одинаковых векторах, получаем трехдиагональную систему уравнений для нахождения ν_k из (22):

$$\begin{gathered} -\alpha_{k-1}^{-1}\nu_{k-1} + \alpha_k^{-1}(1+\beta_k)\nu_k - \alpha_{k+1}^{-1}\beta_k\nu_{k+1} = f_k, \\ \nu_{-1} = \nu_n = 0, \quad k = 0,1,\ldots,n-1. \end{gathered} \tag{23}$$

Подчеркнем, что в представлении (22) для решения u^n коэффициенты ν_k зависят от n, и для их нахождения требуется решать последовательность систем возрастающих порядков вида (23). Это можно сделать экономично с помощью метода прогонки [5], “стандартные” формулы которого в данном случае имеют следующий вид:

$$\begin{gathered} æ_1 = f_1^q / t_1, \quad æ_k = (f_k^q - x_k æ_{k-1})s_k, \\ s_k = (t_k - x_k æ_{k-1})^{-1}, \\ \theta_1 = y_1/t_1, \quad \theta_k = y_k s_k, \quad k = 1,2,\ldots,n-1, \end{gathered} \tag{24}$$
$$\nu_{n-1} = æ_{n-1}, \quad \nu_k = \theta_k\nu_{k+1} + æ_k, \quad k = n-2,\ldots,1.$$

Здесь ради краткости введены обозначения для коэффициентов СЛАУ (23):

$$t_k = \alpha_k^{-1}(1+\beta_k), \quad x_k = \alpha_{k-1}^{-1}, \quad y_k = \alpha_{k+1}^{-1}\beta_k, \quad k = 0,1,\ldots,n-1; \quad x_1 = y_{n-1} = 0.$$

Величины $æ_k$ и θ_k при разных n вычисляются одинаковыми рекурсиями, отличающимися только длиной. Реализация (22) требует одну компоненту решения из (24): $\nu_{n-1} = æ_{n-1}$.

Вопросы устойчивости и точности метода прогонки (24) для решения трехдиагональной СЛАУ (23) играют ключевую роль в эффективности всего алгоритма. Отметим, что рассматриваемый итерационный процесс допускает обобщения и на более широкие типы симметричных алгебраических систем: знаконеопределенных, сингулярных и несовместных, – для которых в классических крыловских подпространствах развиты методы MINRES, MINRES-*QLP* и другие, использующие для решения трехдиагональных СЛАУ типа (23) алгоритмы *QR*- и *QLP*-разложений (см. [8] и цитируемую там литературу).

Рассматриваемый итерационный процесс является обобщением известных алгоритмов сопряженных направлений, поскольку исходный вектор ν^0 подпространства Крылова $\mathcal{K}_n(v^0, A)$ никак не связан с решаемой СЛАУ. Однако методы моментов наследуют вариационные свойства алгоритмов минимальных итераций, или ошибок [9], а также сопряженных градиентов и сопряженных невязок [4, 5] в силу следующего из (20) представления для векторов r^k:

$$r^k = r^0 - \alpha_0 A q^0 - \alpha_1 A q^1 - \ldots - \alpha_{k-1} A q^{n-1}, \tag{25}$$

где векторы обладают свойствами ортогональности (17). Умножая обе части (25) скалярно на вектор $A^{\gamma-2}r^k$, при значениях α_k из (20) получаем выражения

$$\begin{gathered} \varphi_\gamma(r^k, r^k) = (r^k, r^k)_{\gamma-2} = \\ = (r^0, r^0)_{\gamma-2} - \sum_{l=0}^{k-1} (r^0, q^l)_{\gamma-1}^2 / (q^l, q^l)_\gamma, \end{gathered} \tag{26}$$

причем данный функционал достигает максимума в подпространстве $\mathcal{K}_k(v^0, A)$.

В силу оптимальных свойств функционала (26) можно также с помощью чебышевской методологии исследовать скорость сходимости и получить оценку числа итераций $n(\varepsilon)$, необходимых для выполнения условия

$$\varphi_\gamma(r^n, r^n) \le \varepsilon^2 \varphi_\gamma(r^0, r^0), \quad \varepsilon \ll 1. \tag{27}$$

Очевидно, что соответствующее неравенство имеет вид

$$n(\varepsilon) \le 1 + 0.5 æ \ln|\varepsilon/2|, \qquad (28)$$

где æ — число обусловленности матрицы A (см. [4, 5]).

Остановимся на вопросах предобусловливания СЛАУ при использовании методов моментов для уменьшения числа æ в оценке (28). Для сохранения симметричности естественно использовать двустороннее предобусловливание, приводящее уравнение (1) к виду

$$\bar{A}\bar{u} = \bar{f}, \quad \bar{A} = C^{\top}AC, \quad \bar{u} = C^{-1}u, \quad \bar{f} = C^{\top}f, \quad (29)$$

где C — некоторая легко обращаемая невырожденная матрица. В этом случае все предыдущие рассуждения повторяются для предобусловленной СЛАУ с точностью до замены обозначений $\bar{u}, \bar{f}, \bar{A}$. Примером могут служить методы неполной факторизации [5] для системы с матрицей $A = D + L + U$, где D — блочно-диагональная, а L и U — нижняя и верхняя треугольные части матрицы. При этом предобусловленная СЛАУ определяется как

$$\begin{gathered}\bar{A}\bar{u} = (I+\bar{L})^{-1}(\bar{D}+\bar{L}+\bar{U})(I+\bar{U})^{-1}\bar{u} = \\ = \bar{f} = (I+\bar{L})^{-1}G_L^{-1}f, \\ \bar{L} = G_L^{-1}LG_U^{-1}, \quad \bar{D} = G_L^{-1}DG_U^{-1}, \qquad (30) \\ \bar{U} = G_L^{-1}UG_U^{-1}, \quad \bar{u} = (I-\bar{U})G_U u, \\ G_L G_U = G = D - \overline{LG^{-1}U},\end{gathered}$$

где $\overline{LG^{-1}U}$ — некоторая аппроксимация матрицы $LG^{-1}U$. Рассматриваемые в (30) предобусловливатели являются специальным случаем широко распространенных ILU-разложений (см. [4, 5]).

При заданном с.п.о. предобусловливателе B построение предобусловленного процесса Ланцоша представляется как метод ортогонализации, примененный к предобусловленной СЛАУ

$$\bar{A}\bar{u} = \bar{f} = B^{-1/2}f, \quad \bar{A} = B^{-1/2}AB^{-1/2}, \quad \bar{u} = B^{1/2}u.$$

При этом в формулах (11) для новых векторов $w^k = B^{-1/2}p^k$ получим рекуррентное соотношение

$$w^{k+1} = AB^{-1}w^k - \bar{\alpha}_k^{(\gamma)}w^k - \bar{\beta}_k^{(\gamma)}w^{k-1},$$

в котором фактически $B^{1/2}$ не требуется (см. подробнее [8]).

Замечание 2. Отметим также полезность таких простых предобусловливаний, как масштабирование или бинормализация СЛАУ [10], которые соответствуют в (27) диагональным матрицам C и могут употребляться в сочетании с другими предобусловливателями.

Замечание 3. Ю.В. Воробьёвым в [1] рассмотрен обобщенный метод моментов, заключающийся в выборе вместо одного исходного вектора v^0 заданного набора линейно независимых m векторов $v_1^0, \ldots, v_m^0$. В методах решения СЛАУ такие подходы, перспективные с точки зрения распараллеливания, называются блочными крыловскими алгоритмами, см. [11]. Описанные методы без труда обобщаются на их блочные варианты. Получаемые при этом алгоритмы формально допускают мультипредобусловливание, т.е. использование на одной итерации по несколько предобусловливающих матриц и направляющих векторов $p_1^k, \ldots, p_m^k$, см. [12]. Однако обоснование этого подхода для симметричных СЛАУ требует дополнительных исследований.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 18–01–00295).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Воробьёв Ю.В.* Метод моментов в прикладной математике. М.: Физматлит, 1958.
2. *Ахиезер Н.И.* Классическая проблема моментов. М.: Физматлит, 1961.
3. *Liesen J., Strakos Z.* Krylov subspace methods. Principles and analysis. Oxford: Oxford University Press, 2013.
4. *Saad Y.* Iterative methods for sparse linear systems. 2nd. ed. SIAM, 2003.
5. *Ильин В.П.* Методы и технологии конечных элементов. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2007.
6. *Olshanskii M.A., Tyrtyshnikov E.E.* Iterative methods for linear systems theory and applications. SIAM, Philadelphia, 2014.
7. *Craig E.G.* The N-step iteration procedure // J. Math. Phis. 1955. V. 8. P. 64–73.
8. *Choi S.-C.T., Paige C.C., Saunders M.A.* MINRES-QLP: Krylov subspace method for indefinite or singular symmetric systems. SIAM, arXiv:1003.4042[math.NA]. 27 Mar 2015.
9. *Фридман В.М.* Метод минимальных итераций с минимальными ошибками для систем линейных алгебраических уравнений с симметричной матрицей // ЖВМиМФ. 1962. Т. 2. № 2. С. 341–342.
10. *Livne O.E., Golub J.H.* Scaling by binormalazation // Numer. Algorithms. 2004. V. 35(1). P. 97–120.
11. *Nikishin A.A., Eremin A.Y.* Variable block CG algorithms for solving large sparse symmetric positive definite linear systems on parallel computers // SIAM J. Matrix Anal. Appl. 1995. V. 16. P. 1135–1153.
12. *Il'in V. P.* Multi-preconditioned domain decomposition methods in the Krylov subspaces // LNCS, 10187, Springer, 2017. P. 95–107.

ON THE MOMENT METHODS IN KRYLOV SUBSPACES

V. P. Il'in[a,b]

[a] *The Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russian Federation*

[b] *Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS E.E. Tyrtyshnikov

Moment methods in Krylov subspaces for solving symmetric systems of linear algebraic equations (SLAEs) are considered. A family of iterative algorithms is proposed based on generalized Lanczos orthogonalization with the choice of the initial vector v^0 regardless of the initial residual. This approach allows us to solve a series of SLAEs with the same matrix, but different right-hand sides on a single set of basis vectors, and also to implement generalized moment methods that reduce to block Krylov algorithms using a set of linearly independent guess vectors $v_1^0, \ldots, v_m^0$. The performance of algorithm implementations is improved by reducing the number of matrix multiplications and efficient parallelization of vector operations. It is shown that it is possible to extend the applicability of moment methods using preconditioning to various classes of algebraic systems: indefinite, incompatible, asymmetric, and complex, including non-Hermitian ones.

Keywords: moment method, Krylov subspace, parametric Lanczos orthogonalization, conjugate directions algorithms