УДК 519.6

Ортогональные проекторы и системы линейных алгебраических уравнений

И.В. Киреев

Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, Академгородок, 50/44, Красноярск, 660036 E-mail: kiv@icm.krasn.ru

Английская версия этой статьи печатается в журнале "Numerical Analysis and Applications" No 3, Vol. 13, 2020.

Киреев И.В. Ортогональные проекторы и системы линейных алгебраических уравнений // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2020. — Т. 23, № 3. — С. 315–324.

В статье в операторной форме предложена итерационная процедура построения ортогональной проекции вектора на заданное подпространство. Алгоритм базируется на евклидовой ортогонализации степенных последовательностей специального линейного преобразования, порождённого исходным подпространством. Предложен основанный на этой же идее метод численного решения совместных систем линейных алгебраических уравнений. Приведены результаты численных экспериментов.

DOI: 10.15372/SJNM20200306

Ключевые слова: численные методы, линейная алгебра, ортогональные проекторы, метод Качмажа, подпространства Крылова.

Kireev I.V. Orthogonal projectors and systems of linear algebraic equations // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. – Novosibirsk, 2020. – Vol. 23, N $^{\circ}$ 3. – P. 315–324.

In this paper, an operator iterative procedure for constructing of the orthogonal projection of a vector on a given subspace is proposed. The algorithm is based on the Euclidean ortogonalization of power sequences of a special linear transformation generated by the original subspace. For consistent systems of linear algebraic equations, a numerical method based on this idea is proposed. Numerical results are presented.

Keywords: numerical methods, linear algebra, orthogonal projectors, Kaczmarz method, Krylov subspaces.

1. Введение

Обозначим через \mathbb{E} евклидово пространство размерности dim \mathbb{E} со скалярным произведением (u, v) векторов u, v $\in \mathbb{E}$; $||u|| = \sqrt{(u, u)} - длина вектора u [1].$

Пусть \mathbb{V} — подпространство \mathbb{E} , dim $\mathbb{V} < \dim \mathbb{E}$; \mathbb{V}^{\perp} — его ортогональное дополнение до \mathbb{E} , т. е. аннулятор [2] множества \mathbb{V} . Тогда $\mathbb{E} = \mathbb{V} \oplus \mathbb{V}^{\perp}$ — прямая сумма и для любого вектора $\mathbf{u} \in \mathbb{E}$ существует единственное представление

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\mathbb{V}} + \mathbf{u}_{\mathbb{V}}^{\perp}: \quad \mathbf{u}_{\mathbb{V}} \in \mathbb{V}, \quad \mathbf{u}_{\mathbb{V}}^{\perp} \in \mathbb{V}^{\perp}; \tag{1}$$

 $u_{\mathbb{V}}$ называют [2] ортогональной проекцией, а $u_{\mathbb{V}}^{\perp}$ — ортогональной составляющей вектора и относительно \mathbb{V} . Обозначим через \mathcal{P} и \mathcal{P}^{\perp} ортогональные проекторы евклидового пространства \mathbb{E} на \mathbb{V} и \mathbb{V}^{\perp} соответственно. Тогда

© И.В. Киреев, 2020

$$\mathbf{u}_{\mathbb{V}} = \mathcal{P}\mathbf{u}, \ \mathbf{u}_{\mathbb{V}}^{\perp} = \mathcal{P}^{\perp}\mathbf{u}.$$

Задача определения \mathcal{P} и по заданному вектору и является одной из ключевых проблем вычислительной линейной алгебры. В частности, к ней можно свести проблему решения системы линейных алгебраических уравнений. Ниже предлагается в операторной форме итерационный алгоритм построения ортогональной проекции вектора на подпространство и основанный на нём метод численного решения совместной системы линейных алгебраических уравнений.

2. Вычисление ортогональной проекции вектора на подпространство

Далее любое самосопряжённое неотрицательно определённое преобразование \mathcal{A} пространства \mathbb{E} , образ которого есть всё \mathbb{V}^{\perp} , будем коротко называть аннулятором подпространства \mathbb{V} (annihilating transformation). Таким образом, \mathbb{V} совпадает с ядром его аннулятора \mathcal{A} . Числом обусловленности $\mathfrak{B}_{\mathcal{A}}$ последнего будем называть число обусловленности ограничения оператора \mathcal{A} на \mathbb{V}^{\perp} . При отсутствии ошибок округления справедлива

Теорема 1. Для любого аннулятора \mathcal{A} подпространства $\mathbb{V} \subset \mathbb{E}$ и любого вектора $\mathbf{u} \notin \mathbb{V}$ итерационный процесс $\mathbf{u}^0 := \mathbf{u}, \, \mathbf{s}^1 := \mathcal{A}\mathbf{u}^0; \,$ для $n \geq 1$ вычисляем

$$\mathbf{u}^{n} := \mathbf{u}^{n-1} - \frac{(\mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{s}^{n})}{(\mathbf{s}^{n}, \mathbf{s}^{n})} \mathbf{s}^{n}; \qquad \mathbf{s}^{n+1} := \mathcal{A}\mathbf{u}^{n} - \frac{(\mathcal{A}\mathbf{u}^{n}, \mathbf{s}^{n})}{(\mathbf{s}^{n}, \mathbf{s}^{n})} \mathbf{s}^{n};$$
(2)

не более чем за $\dim \mathbb{V}^{\perp}$ шагов приведёт к построению ортогональной проекции \mathcal{P} и вектора и на подпространство \mathbb{V} , т.е. найдётся такое натуральное $k \leq \dim \mathbb{V}^{\perp}$, что $u^k = \mathcal{P}u$. При этом векторы s^1, s^2, \ldots, s^n взаимно ортогональны и

$$\|\mathbf{u}^{n} - \mathcal{P}\mathbf{u}\| \le T_{n}^{-1} \left(\frac{\mathbf{w}_{\mathcal{A}} + 1}{\mathbf{w}_{\mathcal{A}} - 1}\right) \|\mathbf{u} - \mathcal{P}\mathbf{u}\|;$$
(3)

здесь $T_n(x)$ — полином Чебышева первого рода, а $\mathfrak{X}_{\mathcal{A}}$ — число обусловленности \mathcal{A} .

Доказательство первой части теоремы приведено в [3], где на базе процесса (2) предложен алгоритм решения частичной проблемы собственных значений и векторов. Из общей теории [1, 4] методов сопряжённых направлений следует, что на каждом шаге процесса (2) минимизируется $\|\mathcal{P}^{\perp}\mathbf{u}^n\|$ на соответствующем подпространстве Крылова, порождённым \mathcal{A} . Отсюда вытекает неравенство (3).

Соотношение (3) означает, что задача построения ортогональной проекции вектора на подпространство \mathbb{V} может быть эффективно численно решена с помощью процесса (2), если для \mathbb{V} удаётся построить аннулятор \mathcal{A} с небольшим числом обусловленности $\mathfrak{E}_{\mathcal{A}}$. Взяв в качестве \mathcal{A} ортогональный проектор $\mathbb{P}_{\mathbb{V}}^{\perp}$ евклидового пространства \mathbb{E} на \mathbb{V}^{\perp} , решение \mathcal{P} и получим за одну итерацию. Аннулятором \mathbb{V} будет и сумма всех ортогональных проекторов на каждый из векторов, линейной оболочкой которых является \mathbb{V}^{\perp} . При конструировании аннуляторов может быть полезно следующее утверждение:

Теорема 2. Пусть $\mathbb{V}^{\perp} = \mathbb{V}_{a}^{\perp} \oplus \mathbb{V}_{b}^{\perp}$ — прямая сумма подпространств, угол между которыми [5, 6] равен θ ; \mathcal{P}_{a}^{\perp} и \mathcal{P}_{b}^{\perp} — ортогональные проекторы \mathbb{E} на подпространства \mathbb{V}_{a}^{\perp} и \mathbb{V}_{b}^{\perp} соответственно. Тогда для любых положительных α и β оператор $\mathcal{A} = \alpha \mathcal{P}_{a}^{\perp} + \beta \mathcal{P}_{b}^{\perp}$ является аннулятором \mathbb{V} , число обусловленности которого

$$\mathfrak{a}_{\mathcal{A}} = \frac{\alpha + \beta + \sqrt{(\alpha - \beta)^2 + 4\alpha\beta\cos^2\theta}}{\alpha + \beta - \sqrt{(\alpha - \beta)^2 + 4\alpha\beta\cos^2\theta}}$$

удовлетворяет точному неравенству $\mathfrak{A}_{\mathcal{A}} \geq \operatorname{ctg}^2(\theta/2)$, превращающееся в равенство при $\alpha = \beta$.

Доказательство. Очевидно, что преобразование \mathcal{A} является аннулятором пространства \mathbb{V} . Вычислим границы спектра его ограничения на \mathbb{V}^{\perp} . Для определённости будем считать, что dim $\mathbb{V}_{\mathbf{a}}^{\perp} = k \leq \dim \mathbb{V}_{\mathbf{b}}^{\perp} = l$.

Обозначим через a_1, \ldots, a_k и b_1, \ldots, b_l ортонормированные согласованные базисы из главных векторов подпространств \mathbb{V}_a^{\perp} и \mathbb{V}_b^{\perp} (principal vectors of the pair of spaces) [5] соответственно:

$$(a_i, b_j) = 0, i \neq j; (a_i, b_i) = \sigma_i \ge 0, i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, l.$$

Поскольку система векторов
а $_1,\ldots,a_k,b_1,\ldots,b_l$ образует базис во всём \mathbb{V}^\perp то, согласно определению угла между подпространствам
и $\mathbb{V}_{\mathbf{a}}^\perp$ и $\mathbb{V}_{\mathbf{b}}^\perp$,

$$\cos \theta = \sup_{\substack{\mathbf{a} \in \mathbb{V}_{\mathbf{a}}^{\perp}, \|\mathbf{a}\| = 1; \\ \mathbf{b} \in \mathbb{V}_{\mathbf{b}}^{\perp}, \|\mathbf{b}\| = 1}} (\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \sup_{\substack{\sum \alpha_i^2 = 1; \\ \sum \beta_i^2 = 1}} \sum \sigma_i \alpha_i \beta_i = \sigma_1,$$

где σ_1 — наибольшее из сингулярных чисел: $\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \cdots \ge \sigma_k \ge 0$.

Очевидно, что $\cos \theta \in [0, 1)$, так как равенство $\cos \theta = 1$ означает, что \mathbb{V}^{\perp} не является прямой суммой подпространств \mathbb{V}_{a}^{\perp} и \mathbb{V}_{b}^{\perp} .

Пусть λ — произвольное собственное значение преобразования $\mathcal{A} = \alpha \mathcal{P}_{a}^{\perp} + \beta \mathcal{P}_{b}^{\perp}$. Тогда координаты соответствующего собственного вектора $\alpha_{1}, \ldots, \alpha_{k}, \beta_{1}, \ldots, \beta_{l}$ во введённом выше базисе удовлетворяют системе уравнений:

$$(\lambda - \alpha)\alpha_i = \beta \sigma_i \beta_i, \quad (\lambda - \beta)\beta_i = \alpha \sigma_i \alpha_i, \quad i \le k; \quad (\lambda - \beta)\beta_j = 0, \quad k < j \le l.$$

Отсюда следует точное неравенство

$$\frac{\alpha+\beta}{2} - \sqrt{\left(\frac{\alpha-\beta}{2}\right)^2 + \alpha\beta\cos^2\theta} \le \lambda \le \frac{\alpha+\beta}{2} + \sqrt{\left(\frac{\alpha-\beta}{2}\right)^2 + \alpha\beta\cos^2\theta},$$

которому должно удовлетворять λ и выражение для числа обусловленности $\mathfrak{E}_{\mathcal{A}}$.

Избавившись от иррациональности в знаменателе $\mathfrak{B}_{\mathcal{A}}$, получаем

$$\begin{split} \mathfrak{a}_{\mathcal{A}} &= \frac{1}{4(1-\cos^2\theta)} \left[\sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} + \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} + \sqrt{\left(\sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} - \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}\right)^2 + 4\cos^2\theta} \right]^2 \ge \\ &\ge \frac{1}{4(1-\cos^2\theta)} \left[\sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} + \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} + 2\cos\theta \right]^2 \ge \frac{1}{4(1-\cos^2\theta)} \left(2 + 2\cos\theta\right)^2 = \\ &= \frac{1+\cos\theta}{1-\cos\theta} = \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2}, \end{split}$$

причём здесь все равенства достигаются при $\alpha = \beta$. Утверждение доказано.

Так как величина $\operatorname{ctg}^2(\theta/2)$ является минимальным значением функции $\mathfrak{E}_{\mathcal{A}}(\alpha,\beta)$ при $\alpha, \beta > 0$, то, исходя из теоремы 1, при построении аннулятора имеет смысл рассматривать только вариант $\alpha = \beta = 1$. Этот частный случай исследован несколько иным методом в работе [5], где доказано, что все собственные значения преобразования $\mathcal{P}_{a}^{\perp} + \mathcal{P}_{b}^{\perp}$ принадлежат отрезку $[1 - \cos \theta, 1 + \cos \theta]$.

Поскольку реальные вычисления сопровождают ошибки округления, то актуальной является задача построения критерия остановки [1, 7] итерационного процесса (2) — определение номера шага процесса, после которого точность приближения u^n к решению $\mathcal{P}u$ на данном компьютере не может быть существенно улучшена.

Пусть на n-ой итерации (2) уже вычислено направление s^n , к которому вектор u^n должен быть ортогонален. Тогда

$$\|\mathbf{u}^n\|^2 = \|\mathbf{u}^{n-1}\|^2 - \frac{(\mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{s}^n)^2}{\|\mathbf{s}^n\|^2},$$

т.е. норму $\|\mathbf{u}^n\|$ можно вычислить двумя различными способами — рекуррентно и непосредственно $\|\mathbf{u}^n\| = \sqrt{(\mathbf{u}^n, \mathbf{u}^n)}$. Различие между этими величинами может характеризовать накопленную в процессе вычислений ошибку. Эти соображения приводят к следующему критерию остановки работы алгоритма (2):

полагаем $\eta_0 := \|\mathbf{u}^0\|, \, \delta_0 := 0; \,$ для $n \ge 1 \,$ при $\|\mathcal{A}\mathbf{u}^n\| > 0 \,$ вычисляем:

$$\eta_n := \sqrt{\eta_{n-1}^2 - \frac{(\mathbf{u}^{n-1}, \mathbf{s}^n)^2}{\|\mathbf{s}^n\|^2}}, \quad \delta_n := \max\{\delta_{n-1}, \|\|\mathbf{u}^n\| - \eta_n|\}; \quad \rho_n := \frac{(\mathcal{A}\mathbf{u}^n, \mathbf{u}^n)}{\|\mathcal{A}\mathbf{u}^n\|}; \quad (4)$$

процесс (2) прекращаем, если $\|Au^n\| = 0$ или выполняется неравенство

$$\rho_n \le \delta_n; \tag{5}$$

здесь ρ_n — числовая проекция вектора uⁿ на направление \mathcal{A} uⁿ, для которой, в силу неравенств Коши и Канторовича [8], имеет место ограничение

$$\frac{2\sqrt{a}_{\mathcal{A}}}{1+a} \|\mathcal{P}^{\perp}\mathbf{u}^{n}\| \le \rho_{n} \le \|\mathcal{P}^{\perp}\mathbf{u}^{n}\|.$$
(6)

Проекторы являются весьма простыми линейными преобразованиями векторных пространств, а основанные на ортогонализации прямые методы вычислительной линейной алгебры — наиболее устойчивыми к погрешностям округления. Поэтому естественно построить на базе процесса (2) итерационные методы решения основных задач вычислительной линейной алгебры. Одной их таких проблем является решение систем линейных алгебраических уравнений.

3. Алгоритм решения систем линейных алгебраических уравнений

Далее через \mathbb{R}^m обозначаем евклидово пространство *m*-мерных действительных вектор-столбцов со скалярным произведением

$$(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = \sum_{1 \le i \le m} v_i u_i; \quad \mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_m)^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{u} = (u_1, u_1, \dots, u_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^m;$$

"т" означает транспонирование. Наряду с евклидовой нормой ||v|| ниже будем использовать 1-норму $||v||_1$ и ∞ -норму $||v||_{\infty}$ [1] векторов из \mathbb{R}^m :

$$\|\mathbf{v}\|_1 = \sum_{1 \le i \le m} |v_i|, \qquad \|\mathbf{v}\|_{\infty} = \max_{1 \le i \le m} |v_i|; \qquad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^m.$$

Пусть неоднородная система линейных алгебраических вещественных уравнений

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{b} = (b_1, \dots, b_k)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^k, \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_l)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^l, \tag{7}$$

с прямоугольной матрицей A порядка $k \times l$ совместна, rang $A = k \leq l$. Система (7) допускает геометрическую интерпретацию, аналогичную лежащей в основе метода Качмажа [9–13]: построить вектор $y = (y_0, y_1, \ldots, y_l)^T \in \mathbb{R}^{l+1}$ такой, что $y_0 \neq 0$ и

$$(a_i, y) = 0, \quad a_i = (-b_i, a_{i1}, \dots, a_{il})^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{l+1}, \quad i = 1, \dots, k,$$
(8)

здесь $a_{ij} - i, j$ элемент матрицы A. Действительно, пусть вектор у удовлетворяет соотношениям (8). Тогда вектор х = $(y_1/y_0, \ldots, y_l/y_0)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^l$ есть решение исходных уравнений (7). Если система (7) однородна, т. е. b = 0, то вводить дополнительный параметр y_0 не надо.

Для решения задачи (8) воспользуемся процессом (2), полагая, что $\mathbb{E} = \mathbb{R}^{l+1}$ и его подпространство \mathbb{V} совпадает с пространством решений однородной системы (8). Тогда \mathbb{V}^{\perp} является линейной оболочкой строк $\mathbf{a}_{1}^{\mathrm{T}}, \ldots, \mathbf{a}_{k}^{\mathrm{T}}$ расширенной матрицы неоднородной системы (7). В качестве аннулятора можно взять сумму из k ортогональных проекторов на одномерные подпространства, коллинеарные базисным векторам \mathbb{V}^{\perp} :

$$\mathcal{A} = \sum_{1 \le i \le k} \mathcal{P}_i^{\perp}; \qquad \mathcal{P}_i^{\perp} \mathbf{v} = \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{v})}{\|\mathbf{a}_i\|^2} \cdot \mathbf{a}_i; \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{l+1}.$$
(9)

Если систему линейных алгебраических уравнений (8) представить в виде объединения двух систем меньшей размерности, то аннулятор можно построить на основании теоремы 2, полагая $\alpha = \beta = 1$. Начальным приближением к решению у задачи (8) для любого аннулятора \mathcal{A} подпространства \mathbb{V} может служить произвольный вектор не ортогональный у.

Эти два подхода были реализованы при проведении численных экспериментов, которые подтвердили эффективность критерия (4), (5) остановки итераций (2), если $\|b\|_1$ соизмерима с максимальной из 1-норм столбцов матрицы A системы (7). В таком случае числовая проекция ρ_n хорошо коррелируется с ∞ -нормой вектора $\mathcal{P}^{\perp} u^n$, удовлетворяющей очевидному аналогичному (6) неравенству

$$\frac{1}{\sqrt{l+1}} \|\mathcal{P}^{\perp} \mathbf{u}^n\| \le \|\mathcal{P}^{\perp} \mathbf{u}^n\|_{\infty} \le \|\mathcal{P}^{\perp} \mathbf{u}^n\|.$$

Хорошо известно [14], что накопление ошибок округления в итерационных алгоритмах ортогонализации в подпространствах Крылова приводит к нарушению взаимной ортогональности векторов sⁿ. Из-за этого процесс перестаёт быть "конечным", но реально вычисленные sⁿ, как правило, не теряют практической значимости [15]. Вычисления показали, что неточная реализация соотношений (2) подчас приводит к нарушению включения sⁿ $\in \mathbb{V}^{\perp}$, начиная с некоторого шага. Но этого удаётся избежать, регуляризируя процесс (2) следующим образом:

полагаем $\mathbf{u}^0:=\mathbf{u},\,\mathbf{t}^1:=\mathbf{u};\,$ для $n\geq 1$ вычисляем

$$\mathbf{u}^{n} := \mathbf{u}^{n-1} - \frac{(\mathbf{u}^{n-1}, \mathcal{A}\mathbf{t}^{n})}{\|\mathcal{A}\mathbf{t}^{n}\|^{2}} \mathcal{A}\mathbf{t}^{n}; \quad \mathbf{t}^{n+1} := \mathbf{u}^{n} - \frac{(\mathcal{A}\mathbf{u}^{n}, \mathcal{A}\mathbf{t}^{n})}{\|\mathcal{A}\mathbf{t}^{n}\|^{2}} \mathbf{t}^{n}.$$
 (10)

Вычислительные затраты при этом увеличиваются почти вдвое, поскольку на каждом шаге (10) вычисляются аннуляторы векторов u^n и t^n . Если вычисления точны, то вектор s^n из (2) коллинеарен вектору $\mathcal{A}t^n$ и процесс конечен. При реальных вычислениях версия (10) процесса (2) гарантирует принадлежность вектора s^n подпространству \mathbb{V}^{\perp} с максимально возможной точностью.

В случае, когда подпространство \mathbb{V}^{\perp} задаётся системой образующих a_1, \ldots, a_k , как в задаче (8), возможна альтернативная форма процесса (10), аналогичная методу AA^* минимальных итераций [1]. Обозначим через $A_{\rm b}$ расширенную матрицу системы (8), а через $A_{\rm b}^{\rm T}$ — транспонированную к ней:

$$(A_{\rm b})_{ij} = ({\rm a}_i)_j = (A_{\rm b}^{\rm T})_{ji}; \quad i = 1, \dots, k; \quad j = 1, \dots, l+1.$$

Считая начальное приближение у
0 к решению у задачи (8) известным, полагаем
 $\mathbf{r}^0=A_{\rm b}\mathbf{y}^0,\,\mathbf{t}^1=\mathbf{r}^0;\,u$ для $n\geq 1$ вычисляем

$$s^{n} := A_{b}^{T} t^{n}; \quad y^{n} := y^{n-1} - \frac{(y^{n-1}, s^{n})}{(s^{n}, s^{n})} s^{n};$$

$$r^{n} := r^{n-1} - \frac{(y^{n-1}, s^{n})}{(s^{n}, s^{n})} A_{b} s^{n}; \qquad t^{n+1} := r^{n} - \frac{(r^{n}, A_{b} s^{n})}{(s^{n}, s^{n})} t^{n}.$$
(11)

При отсутствии ошибок округления этот процесс конечен, на каждом шаге выполняется равенство $\mathbf{r}^n = A_b \mathbf{y}^n$, а при $\mathcal{A} = A_b^T \cdot A_b$ векторы \mathbf{s}^n в (2) и (11) будут совпадать. Для нормированной системы образующих $\{\mathbf{a}_i : ||\mathbf{a}_i|| = 1\}$ подпространства \mathbb{V}^{\perp} умножение вектора v на матрицу $A_b^T A_b$ равносильно вычислению суммы (9) всех одномерных ортогональных проекторов $\mathcal{P}_i^{\perp} \mathbf{v}$. Благодаря рекуррентному пересчету невязки \mathbf{r}^n на каждой итерации вычислительные затраты в процессах (2) и (11) отличаются незначительно.

4. Вычислительный эксперимент

Рассмотрим на равномерной сетке дискретный аналог первой краевой задачи для эллиптического уравнения с постоянными коэффициентами

$$-\Delta u(x,y) + c \cdot u(x,y) = f(x,y); \quad x \in (0,1), \ y \in (0,1); \ c \ge 0,$$

$$u(x,0) = u(x,1) \equiv 0, \ x \in [0,1]; \quad u(0,y) = u(1,y) \equiv 0, \ y \in [0,1].$$
 (12)

Применяя конечноэлементную типа Q_1 лагранжеву аппроксимацию [16] искомой функции u(x, y) по её узловым значениям

$$u_{ij} = u(M_{ij}), \quad M_{ij}(x_i, y_j), \quad x_i = i/N_x, \quad y_j = j/N_y, \quad i \in \{0, \dots, N_x\}, \quad j \in \{0, \dots, N_y\}, \quad (13)$$

придём, относительно искомых величин u_{ij} , к системе из $m = (N_x - 1)(N_y - 1)$ линейных алгебраических уравнений (7) (k = l = m) с положительно определённой симметричной квадратной матрицей A. Системы линейных алгебраических уравнений такого типа досконально изучены [17] и являются эталонными при тестировании "решателей" крыловского типа.

Серия числовых расчётов производилась в режиме двойной точности [1] при различных значениях параметров c и m. В качестве точного решения х системы (7) были взяты узловые значения случайным образом выбранной гладкой функции, удовлетворяющей однородным краевым условиям из (12). Для наглядности графического представления результатов вычислений, точное решение системы (7) нормировалось по ∞ -норме единицей, после чего определялась правая часть b. Во всех численных экспериментах наблюдалась схожая картина изменения величин δ_n , ρ_n , $\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}\|_{\infty}$ в зависимости от n; здесь \mathbf{x}^n — приближение к решению уравнений (7): $x_i^n = y_i^n/y_0^n$, $i = 1, \ldots, l$. Результаты вычислений, соответствующие значениям параметров $N_x = N_y = 100$, c = 10 и нулевому начальному приближению ($\mathbf{x}^0 = 0$) приведены в графическом виде на рисунках 1–4.



Рис. 1 иллюстрирует течение процесса (2) с аннулятором (9). Графики на рис. 2 порождены тем же алгоритмом, но с аннулятором, построенным на основании теоремы 2 при $\alpha = \beta = 1$. В качестве подпространства \mathbb{V}_{a}^{\perp} взята линейная оболочка строк расширенной матрицы системы (7, 12, 13), ассоциированных с узлами (x_i, y_j) , где $1 \leq i < N_x$ и $1 \leq j \leq N_y/2$. Подпространство \mathbb{V}_{b}^{\perp} дополняет \mathbb{V}_{a}^{\perp} до всего \mathbb{V}^{\perp} , а соответствующие ортогональные составляющие вычислялись по формулам:

$$\mathcal{P}^{\perp}_{\mathrm{a}}\mathrm{u}^n = \mathrm{u}^n - \mathcal{P}_{\mathrm{a}}\mathrm{u}^n, \qquad \mathcal{P}^{\perp}_{\mathrm{b}}\mathrm{u}^n = \mathrm{u}^n - \mathcal{P}_{\mathrm{b}}\mathrm{u}^n.$$

Для вычисления проекций $\mathcal{P}_{a}u^{n}$ и $\mathcal{P}_{b}u^{n}$ применялся процесс (2), (9) с критерием остановки вычислений (4), (5), который хорошо зарекомендовал себя на данном классе задач: значение $||\mathbf{x}^{n} - \mathbf{x}||_{\infty}$, близкое к минимальному, достигалось, как правило, на первой из итераций, когда выполнялось неравенство (5).

Как видно из рис. 2, немонотонный характер поведения ∞-нормы погрешности $x^n - x$ подчас носит характер "срыва точности" (breakdown phenomenon [14]) при увеличении числа итераций. При этом перезапуск процесса после выполнении условия (5) не даёт существенного улучшения. Однако прямое вычисление $\mathcal{P}_{a}^{\perp}u^{n}$ и $\mathcal{P}_{b}^{\perp}u^{n}$ при реализации алгоритмов (10), (11) избавляет от этого феномена. Графики соответствующих зависимостей для этих процессов различаются между собой незначительно и на рис. 3 приведены результаты работы только процесса (10).

Если же модифицировать подпространство \mathbb{V}_{b}^{\perp} , ортогонализовав его образующие, соответствующие узлам $M_{iN_{y}/2}$, $1 \leq i < N_{x}$, к аналогичным векторам из \mathbb{V}_{a}^{\perp} , связанными с узлами M_{ij} , $1 \leq i < N_{x}$, $j = N_{y}/2 - 2$, $N_{y}/2 - 1$, то сходимость итераций к точному решению значительно улучшается. Этот вариант алгоритма можно рассматривать как один из методов декомпозиции области [18] при решении уравнений в частных производных. Соответствующая информация приведена в графическом виде (2) на рис. 4. На



нём сопоставлены пошаговые значения $\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}\|_{\infty}$ для упоминавшихся выше процессов: график (1) приведён ранее на рис. 1; график (3) соответствует рис. 3. Для сравнения приведены результаты работы наиболее быстрой реализации метода сопряжённых градиентов [7] для численного решения системы (7), (12) и (13) — график (4). Видно, что регуляризованные процессы имеют более высокую скорость сходимости итераций \mathbf{x}^n к точному решению х по сравнению с наилучшей версией сопряжённых направлений.

5. Заключение

В статье предложены теоретически обоснованный итерационный метод построения ортогональной проекции вектора на заданное подпространство и процедура определения номера шага процесса, после которого вычисления с данным режимом точности не целесообразны. На базе этих алгоритмов построен метод численного решения совместной системы линейных алгебраических уравнений, аналогичный методу Качмажа. Рассмотрены различные программные реализации метода, проведено сравнение его эффективности с классическим методом сопряжённых градиентов на конкретной задаче. Проведённые в режиме двойной точности численные эксперименты подтвердили работоспособность построенных алгоритмов.

Литература

- 1. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.
- 2. Александров П.С. Лекции по аналитической геометрии. СПб: Лань, 2008.
- 3. Киреев И.В. Ортогонально-степенной метод решения частичной проблемы собственных значений и векторов для симметричной неотрицательно определенной матрицы // Вычислительные методы и программирование. 2016. Т. 17, № 1. С. 44–54.
- 4. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. 2nd edition.—SIAM Society for Industrial & Applied Mathematics, 2003.
- 5. Galàntai A. Subspaces, angles and pairs of orthogonal projections // Linear and Multilinear Algebra. 2008. Vol. 56, № 3. P. 227-260.

- 6. Шилов Г.Е. Математический анализ. Конечномерные линейные пространства. М.: Наука, 1969.
- 7. Киреев И.В. Экономичные критерии останова итераций в методе сопряженных градиентов // Вычислительные технологии. — 2015. — Т. 20, № 2. — С. 44–55.
- 8. Marcus M., Minc H. A Survey of Matrix Theory and Matrix Inequalities.—New York: DOVER PUBLICATIONS, 1992.
- Kaczmarz S. Angenäherte auflösung von systemen lineare Gleichungen // Bull. Intern. Acad. Polonaise Sci. Lett. – 1937. – Vol. 35. – P. 355–357.
- Бабенко В.Н. Сходимость проекционного алгоритма Качмажа // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. — 1984. — Т. 24, № 10. — С. 1571–1573. Перевод: Babenko V.N. The convergency of the Kaczmarz projection algorithm // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1984. — Vol. 24, № 5. — Р. 179–181.
- 11. Ильин В.П. Об итерационном методе Качмажа и его обобщениях // Сиб. журн. индустр. матем. 2006. Т. 9, № 3. С. 39–49. Перевод: Il'in, V.P. On the Kaczmarz iterative method and its generalizations // J. Appl. Ind. Math. 2008. Vol. 2. Р. 357–366.
- 12. **Ильин В.П.** О проекционных методах в подпространствах Крылова // Записки научных семинаров ПОМИ. 2018. Т. 472. С. 103–119.
- Liu J. and Wright S.J. An accelerated randomized Kaczmarz algorithm // Math. Comp. 2016. – Vol. 85. – P. 153–178.
- 14. Quarteroni A., Sacco R., and Saleri F. Numerical Mathematics. Texts in Applied Mathematics. Vol. 37. New York: Springer Science+Business Media, 2007.
- 15. Liesen J. and Strakos Z. Krylov Subspace Methods: Principles and Analysis. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford: Oxford University Press, 2013.
- 16. Le Dret H. and Lucquin B. Partial Differential Equations: Modeling, Analysis and Numerical Approximation. International Series of Numerical Mathematics.—Springer, 2016.
- 17. Даутов Р.З., Карчевский М.М. Введение в теорию метода конечных элементов. Учебное пособие. Казань: КГУ, 2004.
- Quarteroni A. and Valli A. Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. Numerical Mathematics and Scientific Computation. — Oxford Science Publication, 1999.

Поступила в редакцию 19 февраля 2019 г. После исправления 31 января 2020 г. Принята к печати 16 апреля 2020 г.

Литература в транслитерации

- 1. Voevodin V.V., Kuznetsov YU.A. Matritsy i vychisleniya. M.: Nauka, 1984.
- 2. Aleksandrov P.S. Lektsii po analiticheskoi geometrii. SPb: Lan', 2008.
- 3. Kireev I.V. Ortogonal'no-stepennoi metod resheniya chastichnoi problemy sobstvennyh znachenii i vektorov dlya simmetrichnoi neotritsatel'no opredelennoi matritsy // Vychislitel'nye metody i programmirovanie. 2016. T. 17, № 1. S. 44–54.
- 4. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. 2nd edition.—SIAM Society for Industrial & Applied Mathematics, 2003.
- 5. Galàntai A. Subspaces, angles and pairs of orthogonal projections // Linear and Multilinear Algebra. 2008. Vol. 56, № 3. P. 227-260.
- 6. Shilov G.E. Matematicheskii analiz. Konechnomernye lineinye prostranstva. M.: Nauka, 1969.

- 7. **Kireev I.V.** Ekonomichnye kriterii ostanova iteratsii v metode sopryazhennyh gradientov // Vychislitel'nye tekhnologii. 2015. T. 20, № 2. S. 44–55.
- 8. Marcus M., Minc H. A Survey of Matrix Theory and Matrix Inequalities.—New York: DOVER PUBLICATIONS, 1992.
- 9. Kaczmarz S. Angenäherte auflösung von systemen lineare Gleichungen // Bull. Intern. Acad. Polonaise Sci. Lett. -- 1937. -- Vol. 35. -- P. 355-357.
- Babenko V.N. Skhodimost' proektsionnogo algoritma Kachmazha // Zhurn. vychisl. matem. i matem. fiz. – 1984. – T. 24, Nº 10. – S. 1571–1573. Perevod: Babenko V.N. The convergency of the Kaczmarz projection algorithm // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 1984. – Vol. 24, Nº 5. – P. 179–181.
- Il'in V.P. Ob iteratsionnom metode Kachmazha i ego obobscheniyah // Sib. zhurn. industr. matem. - 2006. - T. 9, N^Q 3. - S. 39-49. Perevod: Il'in, V.P. On the Kaczmarz iterative method and its generalizations // J. Appl. Ind. Math. - 2008. - Vol. 2. - P. 357-366.
- 12. Il'in V.P. O proektsionnyh metodah v podprostranstvah Krylova // Zapiski nauchnyh seminarov POMI. 2018. T. 472. S. 103–119.
- Liu J. and Wright S.J. An accelerated randomized Kaczmarz algorithm // Math. Comp. 2016. – Vol. 85. – P. 153–178.
- 14. Quarteroni A., Sacco R., and Saleri F. Numerical Mathematics. Texts in Applied Mathematics. Vol. 37. New York: Springer Science+Business Media, 2007.
- 15. Liesen J. and Strakos Z. Krylov Subspace Methods: Principles and Analysis. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford: Oxford University Press, 2013.
- 16. Le Dret H. and Lucquin B. Partial Differential Equations: Modeling, Analysis and Numerical Approximation. International Series of Numerical Mathematics.—Springer, 2016.
- 17. Dautov R.Z., Karchevskii M.M. Vvedenie v teoriyu metoda konechnyh elementov. Uchebnoe posobie. Kazan': KGU, 2004.
- 18. Quarteroni A. and Valli A. Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. Numerical Mathematics and Scientific Computation. — Oxford Science Publication, 1999.