

На правах рукописи

Моджтаба Гасеми Камалванд

**Сопряжённо-нормальные матрицы и методы
конгруэнтного типа для систем линейных
алгебраических уравнений**

01.01.07 — вычислительная математика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Москва—2009

Работа выполнена на кафедре общей математики Факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Икрамов Хаким Дододжанович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Морозов Владимир Алексеевич

кандидат физико-математических наук
старший научный сотрудник
Белянков Анатолий Яковлевич.

Ведущая организация: Институт вычислительной математики РАН

Защита состоится **29 мая** 2009 года в **15** часов на заседании диссертационного совета Д 501.002.09 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, Ленинские горы, д.1, стр.4, НИВЦ МГУ, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИВЦ МГУ.

Автореферат разослан 16 апреля 2009 года

Ученый секретарь
диссертационного совета

Суворов В.В.

Общая характеристика работы

Актуальность работы

Метод сопряжённых градиентов (м.с.г.) является одним из наиболее известных алгоритмов для решения систем линейных уравнений. Предложенный первоначально (в 1952-53 гг.) как прямой метод для систем с положительно определёнными матрицами коэффициентов, он с 1970-х годов стал использоваться как итерационный метод и в таком качестве приобрёл огромную популярность. Этому способствовало следующее свойство метода: на каждом его шаге величины, необходимые для продолжения процесса, — направление спуска, текущее приближение к решению системы, его невязка, — определяются посредством коротких (двух- или трёхчленных) рекурсий через аналогичные величины, вычисленные на предыдущих шагах. В 1970-х годах была осознана связь м.с.г. с алгоритмом Ланцоша, методом, предназначенным для вычисления собственных значений симметричных матриц и не требовавшим от этих матриц знакоопределённости. Это позволило Пэйджу и Сондерсу построить в 1975 г. методы для симметричных незнакоопределённых систем, сохраняющие главное достоинство м.с.г., а именно описание каждого шага посредством коротких рекурсий.

В 1981 г. Голуб сформулировал следующую задачу: найти трёхчленные формулы спуска типа м.с.г. для несимметричных (а в комплексном случае — неэрмитовых) матриц либо доказать, что таких формул не существует. Упоминание о *спуске* здесь не случайно: оно подразумевает, что в пробных подпространствах, используемых методом, строятся ортогональные базисы. Это сообщает процессу некоторый запас численной устойчивости, отсутствующий в таких, например, методах, как BiCG

(алгоритм бисопряжённых градиентов), тоже управляемый короткими рекурсиями.

Задача Голуба была вскоре решена В.В. Воеводиным и Е.Е. Тыртышниковым в СССР и — независимо и несколько позже — американцами Фабером и Мантойфелем. Полученный ими ответ оказался разочаровывающим: если ограничиться обычной унитарной (а не произвольной положительно определённой) метрикой в \mathbb{C}^n и исключить из рассмотрения матрицы с небольшим числом различных собственных значений, то построение метода желаемого типа возможно лишь для матриц A , являющихся линейными многочленами от эрмитовых матриц, т.е. для матриц вида $A = \alpha H + \beta I$, $H = H^*$.

Несмотря на этот отрицательный ответ, задача Голуба положила начало целому направлению исследований, в которых изучается возможность построения алгоритмов типа м.с.г. для различных классов неэрмитовых систем при тех или иных расширительных допущениях. Так, на каждом шаге методов, исследованных американскими математиками Ягелсом, Райхелем, Бартом и Мантойфелем, разрешается использовать несколько ранее вычисленных матрично-векторных произведений, а не одно, как в м.с.г. В методе MINRES-N, построенном Дана, Зыковым и Икрамовым, наряду с произведениями вида Av вычисляются произведения вида A^*w , и т.д. То обстоятельство, что данное направление остаётся актуальным, подтверждается появлением в 2008 г. обзора по экономичным итерационным методам типа м.с.г. в авторитетном журнале SIAM Review.

Цель работы

В настоящей работе автор ставил перед собой следующие цели:

1. Исходя из интерпретации м.с.г., MINRES, GMRES и других методов как итерационных вариантов прямых процедур для приведения матриц к

тем или иным компактным формам, исследовать возможности построения итерационных методов, проистекающие из замены в этих процедурах унитарных подобиий унитарными конгруэнциями. По отношению к комплексным симметричным системам такая попытка была предпринята в 1999 г. немецкими математиками Бунзе-Герстнер и Стевером. Одной из основных задач диссертации было распространение построенного ими метода CSYM на как можно более широкий класс систем. Таким классом оказались системы с сопряженно-нормальными матрицами коэффициентов. От расширения метода CSYM, которое автор хотел построить и которое назвал MINRES-CN, требовалось, чтобы для систем указанного класса оно выдерживало конкуренцию с широко известным методом GMRES (обобщенным методом минимальных невязок). В частности, по сравнению с GMRES, новый метод должен предъявлять меньшие требования к памяти и выполнять меньшую арифметическую работу на каждом шаге.

2. Определить типы сопряженно-нормальных матриц, для которых MINRES-CN может быть реализован посредством рекурсии с фиксированным числом членов. Составить Matlab-процедуры для этих типов матриц и сравнить их производительность с производительностью библиотечной процедуры gmres, реализующей GMRES в Matlab'e.

3. Исследовать возможность применения MINRES-CN и, в особенности, его вариантов, управляемых короткими рекурсиями, к малоранговым возмущениям симметричных и сопряженно-нормальных матриц.

4. В связи с недостаточной изученностью класса сопряженно-нормальных матриц, исследовать некоторые задачи теоретического характера, относящиеся к этому классу, а также задачи более широкого плана, например, приводимость комплексных матриц (не обязательно сопряженно-нормальных) к компактным формам посредством унитарных

конгруэнций.

Научная новизна работы

Впервые построен метод конгруэнтного типа (т.е. метод, в основе которого лежит унитарное приведение матрицы посредством конгруэнций), работающий для всего класса сопряженно-нормальных матриц. Этот метод, названный MINRES-CN, имеет меньшие требования к памяти, чем GMRES, и выполняет меньшую работу на каждом шаге.

С теоретической точки зрения, значение работы состоит в том, что показана возможность построения итерационных методов, управляемых короткими рекурсиями, для нового класса матриц, а именно сопряженно-нормальных матриц с псевдособственными значениями, лежащими на алгебраических кривых невысокого порядка. Показано также, что эти методы применимы и к малоранговым возмущениям симметричных и сопряженно-нормальных матриц даже в том случае, если возмущенные матрицы уже не являются сопряженно-нормальными.

Различные варианты метода MINRES-CN реализованы в виде Matlab-процедур и показали значительно более высокую эффективность, чем библиотечная Matlab-процедура gmres.

Практическая значимость работы

Решение систем линейных уравнений является одной из важнейших задач практических вычислений. Метод MINRES-CN, разработанный в данной диссертации, предназначен для нового класса линейных систем, а именно систем с сопряженно-нормальными матрицами коэффициентов. Он включает в себя, в частности, комплексные системы с симметричными и кососимметричными матрицами. В этом круге задач MINRES-CN значительно эффективней используемого в настоящее время

метода GMRES. Можно надеяться поэтому, что составленные автором программные реализации MINRES-CN и его вариантов найдут применение в практических расчетах.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на следующих семинарах:

Научный семинар кафедры вычислительных методов факультета ВМиК МГУ под руководством профессора А.В. Гулина.

"Матричные методы и вычисления"; научный руководитель — чл.-кор. РАН Е.Е. Тыртышников; Институт вычислительной математики РАН.

"Современные проблемы численного анализа"; научный руководитель — профессор В.А. Морозов; НИВЦ МГУ.

Научно-методологический семинар НИВЦ МГУ; научный руководитель — профессор А.В. Тихонравов.

Публикации

Основные результаты диссертации отражены в публикациях [1–5].

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав основного текста, списка литературы и приложения.

Объем диссертации — 112 страниц.

Библиография включает в себя 46 наименований.

Краткое содержание работы

Во **введении** диссертации дан очерк истории вопроса о построении экономических итерационных методов типа м. с. г. Сформулированы цели работы и кратко изложено ее содержание.

Глава 1. Псевдоподобия и унитарные конгруэнции

Псевдоподобиями называются преобразования комплексных матриц, имеющие вид

$$A \longrightarrow P^{-1}A\bar{P}, \quad (1)$$

где P — заданная невырожденная матрица. Частным случаем этих преобразований являются унитарные конгруэнции

$$A \longrightarrow Q^T A Q, \quad (2)$$

получаемые из (1) в том случае, если $Q = \bar{P}$ — унитарная матрица. Преобразования этих двух типов недостаточно освещены в книжной литературе по теории матриц, поэтому в первых двух параграфах данной главы приведена сводка важнейших сведений о них. Материал для этих двух параграфов был отобран из журнальных публикаций. Здесь, в частности, введены понятия псевдособственных значений и псевдоинвариантных подпространств, а также описаны канонические и компактные формы относительно тех и других преобразований.

Заключительный параграф первой главы имеет оригинальное содержание. Рассматривается вопрос о достижимости различных компактных форм посредством унитарных конгруэнций. Основной результат состоит в том, что если компактная форма содержит более $n(n - 1)/2$ нулевых элементов, то найдутся $n \times n$ -матрицы, которые не могут быть приведены к такой форме. Отсюда, в частности,

следует, что при $n \geq 5$ существуют (несимметричные) матрицы, неприводимые к трёхдиагональному виду. Отметим, что аналогичные вопросы относительно унитарных подобий изучались и были решены в журнальной литературе двух последних десятилетий.

Глава 2. Сопряженно-нормальные матрицы

Матрица $A \in M_n(\mathbf{C})$ (пространства комплексных $n \times n$ -матриц) называется *нормальной*, если

$$AA^* = A^*A, \quad (3)$$

и *сопряжённо-нормальной*, если

$$AA^* = \overline{A^*A}. \quad (4).$$

В вещественном случае эти определения совпадают и описывают одно и то же множество; в комплексном случае они существенно различаются. Так, свойство (3) сохраняется унитарными подобиями, а свойство (4) нет. Напротив, унитарные конгруэнции сохраняют свойство (4), но не свойство (3).

Хорошо известно, какую важную роль нормальные преобразования и матрицы играют в классической линейной алгебре. Сопряжённо-нормальные матрицы выполняют сходную роль в теории унитарных конгруэнций. В § 2.1 дан краткий очерк основных свойств сопряжённо-нормальных матриц в сопоставлении с соответствующими свойствами нормальных матриц. Поскольку книжная литература по этому вопросу отсутствует, этот очерк, как и в случае §§ 1.1 и 1.2, составлен на основе журнальных публикаций.

Множества нормальных и сопряжённо-нормальных матриц не являются комплексными аналитическими многообразиями, чему препятствует

участие сопряжённой матрицы A^* в определениях (3) и (4), а в случае свойства (4) — ещё и знак комплексного сопряжения в правой части. Однако оба множества суть вещественные аналитические (и даже алгебраические) подмногообразия в $M_n(\mathbf{C})$. Анализ множества нормальных матриц как вещественного алгебраического многообразия был выполнен в 1998 г. Х.Д. Икрамовым. В § 2.2 проведен аналогичный анализ для множества сопряжённо-нормальных матриц. Вычислена размерность этого многообразия (она равна $n^2 + n$) и показана его приводимость. Для сравнения упомянем, что многообразие \mathcal{N}_n , состоящее из комплексных нормальных $n \times n$ -матриц, неприводимо.

Представим матрицу $A \in M_n(\mathbf{C})$ ($n \geq 3$) в блочном виде

$$A = \begin{pmatrix} B & C \\ D^* & E \end{pmatrix}$$

где $B \in M_m(\mathbf{C})$ ($1 < m < n$) и C, D — матрицы размера $m \times (n - m)$. Для нормальной матрицы A , не являющейся эрмитовой или косоэрмитовой, нормальность подматрицы B представляет собой весьма нестандартную ситуацию, немало говорящую о частичной структуре A или ее структуре в целом. Например, в контексте приведения A к форме Хессенберга H посредством алгоритма Арнольди, немецкий математик Хукле обнаружил следующее обстоятельство : если H неразложима и ее ведущая главная подматрица H_m ($1 < m < n$) нормальна, то в действительности H — трехдиагональная матрица. Позднее, в работе Х.Д. Икрамова и Л. Эльзнера, этот факт был оформлен и доказан как чисто теоретико-матричная теорема, без какого-либо упоминания о методе Арнольди. В § 2.3 проведено аналогичное исследование для сопряжённо-нормальной хессенберговой матрицы H с сопряжённо-нормальной главной подматрицей H_m .

Глава 3. Метод MINRES-CN

Эта глава является основной в диссертации. Она начинается обсуждением понятия конечного ортогонального процесса (§3.1), а затем подробным анализом метода CSYM (§3.2). Упомянутые выше Бунзе-Герстнер и Стевер, авторы CSYM, считают, что используемые в этом методе пробные подпространства радикально отличаются от крыловских. Однако в диссертации указана их связь с крыловскими подпространствами специального типа. Для этого комплексной симметричной матрице A рассматриваемой системы сопоставляется эрмитова матрица \hat{A} удвоенного порядка

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{A} \\ A & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Оказывается, что степенная последовательность, генерируемая матрицей \hat{A} и вектором

$$v = \begin{pmatrix} q_1 \\ \bar{q}_1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

полученным путем "удвоения" начального вектора q_1 метода CSYM, при проектировании её на \mathbf{C}^n порождает пробные подпространства этого метода.

Найденная связь между CSYM и алгоритмом Ланцоша используется в §3.4 для того, чтобы распространить CSYM на весь класс сопряжённо-нормальных матриц. Прежним образом сопоставим матрице A и начальному вектору q_1 матрицу \hat{A} и вектор v удвоенной размерности. Для сопряжённо-нормальной A матрица \hat{A} оказывается нормальной в обычном смысле. В 1997 г. Х.Д. Икрамов и Л. Эльзнер показали, что всякая нормальная матрица может быть приведена к блочно-трёхдиагональной форме, в которой порядки диагональных блоков в типичном случае принимают последовательные значения 1,2,3,... Такое приведение может

быть достигнуто посредством конечной последовательности элементарных унитарных подобий или в итерационной форме, которую Икрамов и Эльзнер назвали обобщённым процессом Ланцоша. Суть этого процесса кратко изложена в § 3.3.

Предположим, что обобщённый процесс Ланцоша применён к матрице \hat{A} и начальному вектору v . Спроектируем на \mathbf{C}^n векторы построенной обобщённой степенной последовательности. В результате будут получены пробные подпространства некоторого итерационного процесса, идущего в \mathbf{C}^n . Ортонормированная система векторов, начинающаяся с q_1 и извлекаемая из этих пробных подпространств, определяет приведение к блочно-трёхдиагональной форме H самой матрицы A . Это приведение достигается уже не подобиями, а унитарными конгруэнциями, но о матрице H можно сказать то же самое, что и в обобщённом процессе Ланцоша: в общем случае порядки её диагональных блоков даются последовательными натуральными числами $1, 2, 3, \dots$. Как следствие, число ненулевых элементов в H выражается величиной $O(n^{3/2})$, тогда как форма Хессенберга матрицы A содержит $\approx \frac{1}{2}n^2$ ненулевых элементов. Это означает, что на каждом шаге обобщённого CSYM-процесса, названного MINRES-CN, выполняется значительно меньшая арифметическая работа, чем в методе GMRES.

Ситуация ещё более благоприятна, если о вспомогательной матрице \hat{A} известно, что её спектр лежит на плоской алгебраической кривой невысокой степени k . (Эту же ситуацию можно эквивалентным образом описать в терминах величин, называемых псевдособственными значениями матрицы A .) Для такой A порядки диагональных блоков в блочно-трёхдиагональной форме H , достигнув значения k , стабилизируются на этом значении, а саму H можно интерпретировать как ленточную матрицу с шириной ленты, определяемой числом k . В итерационном процессе решения линейной системы $Ax = b$ ленточность матрицы H означает,

что число членов в рекурсии, дающей очередной вектор ортонормальной системы, не зависит от номера шага. Такой процесс можно рассматривать как положительное решение задачи Голуба, если вместо трёхчленных рекурсий допустить рекурсии с любым фиксированным числом членов, не зависящим от порядка n системы. Обнаружение подобных процессов и указание соответствующих им классов матриц относится к числу главных результатов диссертации.

Случаю $k = 2$ в диссертации уделено особое внимание. Соответствующая этому случаю разновидность метода MINRES-CN названа MINRES-CN2. В § 3.5 обсуждаются особенности процесса ортогонализации в MINRES-CN2, способы выбора приближённых решений в пробных подпространствах и экономичные способы пересчёта нормы невязки при переходе к очередному шагу. В § 3.6 описаны численные эксперименты, в которых MINRES-CN2 сравнивался с GMRES. Поскольку арифметическая работа, выполняемая на одном шаге, в первом методе существенно меньше, чем во втором, то основным критерием сравнения было число итераций до достижения заданного уровня для нормы невязки. Оказалось, что и по этому показателю MINRES-CN2 во многих случаях значительно превосходит GMRES. Распечатка Matlab-процедуры, реализующей MINRES-CN2, приведена в Приложении.

Глава 4. Малоранговые возмущения симметричных и сопряженно-нормальных систем

Результаты этой главы существенно развивают теорию метода MINRES-CN. Здесь рассматривается вопрос о применимости метода в том случае, если симметричная или сопряженно-нормальная матрица коэффициентов линейной системы подвергается малоранговым возмущениям. В § 4.1

исследуется ситуация, когда матрица S симметрична, её возмущение K кососимметрично и имеет малый ранг, а матрица $A = S + K$ всё ещё сопряжённо-нормальная. При этих предположениях применимость к A варианта MINRES-CN k при подходящем k не вызывает сомнения. Однако неожиданным оказывается то обстоятельство (доказываемое в § 4.1), что, начиная с некоторого шага, расчётные формулы для такой матрицы A можно сократить до трёхчленной рекурсии, что существенно уменьшает арифметическую работу, выполняемую методом.

Если матрицы S и K не связаны специальным соотношением псевдоперестановочности, то их сумма $A = S + K$ не будет сопряжённо-нормальной матрицей. Эта ситуация рассматривается в § 4.2. Показано, что при малоранговой компоненте K матрица A , несмотря на отсутствие свойства сопряженной нормальности, всё ещё может быть приведена к блочно-трёхдиагональной форме, в которой оценка на размер диагонального блока даётся числом, зависящим от $k = \text{rank } K$. Таким образом, MINRES-CN, построенный как метод для сопряжённо-нормальных матриц, оказывается применимым и к некоторым матрицам, не являющимся сопряженно-нормальными.

Ещё более общие результаты установлены в § 4.3. Здесь рассматриваются произвольные малоранговые возмущения нормальных или сопряжённо-нормальных матриц. Предполагается, что исходная матрица N допускает приведение к блочно-трёхдиагональному виду (посредством, соответственно, унитарных подобий или конгруэнций) с достаточно хорошей оценкой ω_0 для размера диагонального блока. Доказано, что и возмущённая матрица $A = N + R$ может быть приведена к блочно-трёхдиагональной форме. Разумеется, оценка на размер диагонального блока ухудшается пропорционально рангу добавки R . Заметим, что матрица A не обязана быть нормальной или сопряжённо-

нормальной.

Основные результаты работы

Основной результат диссертации состоит в построении нового итерационного метода, предназначенного для решения систем линейных уравнений с сопряженно-нормальными матрицами коэффициентов. На этом классе систем построенный метод MINRES-CN значительно превосходит по памяти и быстродействию хорошо известный метод GMRES. Новизна метода состоит в том, что в (неявном) приведении матрицы системы к компактной форме унитарные подобия заменяются унитарными конгруэнциями. Практическую ценность метода MINRES-CN значительно повышают следующие результаты, полученные диссертантом:

1. Если все псевдособственные значения матрицы A сосредоточены на алгебраической кривой невысокой степени k , то MINRES-CN описывается рекурсией фиксированной длины (зависящей от k). До сих пор методы с этим свойством были известны только для некоторых типов нормальных и комплексных симметричных матриц.

2. Показано, что экономичные варианты метода MINRES-CN применимы и к матрицам, являющимся малоранговыми возмущениями сопряженно-нормальных матриц. Эти возмущенные матрицы могут уже не быть сопряженно-нормальными.

3. Доказано, что для сопряженно-нормальной матрицы с малоранговой кососимметричной компонентой MINRES-CN, начиная с некоторого шага, фактически управляется трехчленной рекурсией подобно классическому методу Ланцоша.

В теоретических разделах диссертации получено несколько интересных результатов, относящихся к свойствам сопряженно-нормальных матриц и

к возможности приведения произвольных матриц к компактным формам посредством унитарных конгруэнций.

Публикации по теме диссертации

1. Гасеми Камалванд М., Икрамов Х. Д. Сопряженно-нормальные матрицы с сопряженно-нормальными подматрицами // Зап. научн. семин. ПОМИ. 2007. Т. 346. С. 21–25.

2. Гасеми Камалванд М., Икрамов Х. Д. О достижимости компактных форм посредством унитарных конгруэнций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48. N 8. С. 1339–1343.

3. Гасеми Камалванд М., Икрамов Х. Д. О размерности многообразия сопряженно-нормальных матриц // ДАН. 2008. Т. 423. N 6. С. 727–729.

4. Гасеми Камалванд М., Икрамов Х. Д. Об одном методе конгруэнтного типа для линейных систем с сопряжённо-нормальными матрицами коэффициентов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т. 49. N 2. С. 203–216.

5. Гасеми Камалванд М., Икрамов Х. Д. Малоранговые возмущения симметричных матриц и их компактные формы относительно унитарных конгруэнций // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т. 49. N 4. С. 595–600.

6. Гасеми Камалванд М., Икрамов Х. Д. Малоранговые возмущения нормальных и сопряженно-нормальных матриц и их компактные формы относительно унитарных подобий и конгруэнций // Вестн. Моск. ун-та. Серия "Вычисл. математика и кибернетика". 2009. N 3. С.