114

Ричард Варга

ПОСЛЕДНИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ В ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЕ И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯХ

Введение

Статья состоит из трех частей. В первой части рассматриваются новые классы ω - и τ -матриц Энгеля и Шнейдера, применение этих классов к задаче о кругах Гершгорина для матриц, и завершается эта часть интересной нерешенной задачей и связанными с ней предположениями. Во второй части рассматриваются асимптотические результаты итерационного метода последовательной верхней релаксации на измельчающихся сетках. В третьей части обсуждается связь между графо-теоретическими методами в методах с простой или частичной факторизацией и их использование в итерационных методах сопряженных градиентов с сильно неявной факторизацией.

Часть I. ω - и τ -матрицы

I.I. Введение

В последней статье Энгель и Шнейдер [I.I] ввели два новых важных класса матриц в $C^{n,n}$, называемых ω -матрицами и τ - матрицами, и установили некоторые интересные свойства для этих матриц. Эти матрицы представляют значительный интерес, поскольку включают в качестве особых случаев эрмитовы матрицы, M – матрицы и вполне неотрицательные матрицы Крейна и Гантмахера.

Чтобы определить эти классы, положим $\langle n \rangle := \{1,2,\dots,n\}$ для каждого положительного целого числа n, и пусть α обозначает подмножество $\langle n \rangle$, а $|\alpha|$ обозначает мощность множества α. Затем, для $A = [a_{i,j}] \in C^{n,n}$ выражение $A[\alpha]$ обозначает основную подматрицу A, определяемую через α т.е. $A[\alpha] = [a_{i,j}]$, где $i,j \in \alpha$.

Введем обозначение $spec(A) := \{\lambda \in C : det(A - \lambda I) = 0\}$. Тогда множество

$$l(A) := \min \{\lambda : \lambda \in spec(A) \cap R\} \qquad (1.1)$$

определено для любой матрицы $A \in C^{n,n}$ при обычном условии $l(A) := +\infty$, если A не имеет вещественных собственных значений.

Определение I. (Энгель и Шнейдер [I.I]). Матрица $A \in C^{n,n}$ называется ω- матрицей, если

$$l(A[\alpha]) < +\infty \quad \forall \emptyset \neq \alpha \subseteq \langle n \rangle \qquad (1.2)$$

и из

$$\emptyset \neq \alpha \subseteq \beta \subseteq \langle n \rangle \quad \text{следует} \quad l(A[\beta]) \leq l(A[\alpha]). \qquad (1.3)$$

Совокупность всех ω – матриц в $C^{n,n}$ обозначается через $\omega_{\langle n \rangle}$. Матрица $A \in \omega_{\langle n \rangle}$ далее называется τ – матрицей (см. [I.I]), если

$$l(A) \geq 0. \qquad (1.4)$$

Совокупность всех τ – матриц в $C^{n,n}$ обозначается через $\tau_{\langle n \rangle}$. Если матрицы $A, B \in \omega_{\langle n \rangle}$, то $A \geq \tau B$ при

$$l(A[\alpha]) \geq l(B[\alpha]) \quad \forall \emptyset \neq \alpha \subseteq \langle n \rangle. \qquad (1.5)$$

I.2. Приложение

Хотя τ- и ω-матрицы введены недавно, я подозреваю, что в будущем они будут применяться в различных областях математики. Одно из таких применений (в настоящее время более теоретического характера) в линейной алгебре заключается в следующем: пусть дана матрица $A = [a_{i,j}] \in C^{n,n}$. Тогда ее минимальный круг Гершгорина $G(A)$ определяется (см. [I.3]) как

$$G(A) := \bigcap_{x \in R^n_+} \{ \bigcup_{i=1}^{n} \{ z \in C : |z - a_{i,i}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{i,j}| x_j / x_i \}. \quad (1.6)$$

Далее, если $B = [b_{i,j}] \in C^{n,n}$, то $|B| := [|b_{i,j}|] \in R^{n,n}$. Возникает вопрос, как определить условия, которые характеризуют матрицы A и B из $C^{n,n}$ такие, что вложение $G((D + B)[\alpha]) \subseteq G((D + A)[\alpha])$ справедливо для всех $\alpha \subseteq \langle n \rangle$ при произвольной диагональной матрице D в $C^{n,n}$. Ответ дает

Т е о р е м а I.I (Энгель, Варга [I.2]). Пусть даны матрицы $A = [a_{i,j}]$ и $B = [b_{i,j}]$ из $C^{n,n}$. Тогда следующие соотношения эквивалентны:

$$\begin{cases} \text{i) } G((D + B)[\alpha]) \subseteq G((D + A)[\alpha]) \text{ для каждого } \emptyset \neq \alpha \subseteq \langle n \rangle \\ \text{и для каждой } D = \mathrm{diag}[d_1, d_2, \ldots, d_n] \in C^{n,n}; \qquad (1.7) \\ \text{ii) } a_{i,i} = b_{i,i} \text{ для каждого } i \in \langle n \rangle \text{ и } D - |B| \geq \tau D - |A| \\ \text{для каждой вещественной } D = \mathrm{diag}[d_1, d_2, \ldots, d_n] \in R^{n,n} \end{cases}$$

I.3. Нерешенные вопросы и предположения

Имеется интересный открытый вопрос, касающийся полуустойчивости τ - матриц: если $A \in \tau_{\langle n \rangle}$, то следует ли отсюда, что $\{\mathrm{Re}\, \lambda : \lambda \in sp(A)\} \geq 0$? Ответ утвердителен, если n =I, 2, 3 и неизвестен для $n > 3$. Я полагаю, что эта полуустойчивость справедлива для всех n. По-видимому, если

$$\varphi(A) := \begin{cases} \max\ [\tan^{-1}(y/x) : (x + iy) \in sp\,(A) \text{ при } y > 0]; \\ 0, \text{ если все собственные значения матрицы } A \\ \quad \text{вещественны и неотрицательны.} \end{cases}$$

Предположение I.

$$\max\ \{\varphi(A) : A \in \tau_{\langle n \rangle}\} = \pi\left(\frac{n-2}{2n}\right) \quad \forall n \geq 2.$$

Предположение 2. Вышеуказанное равенство достигается при $n \geq 2$ только для M – матриц особого вида

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \ddots & -1 \\ -1 & & & 1 \end{bmatrix}, \quad A \in R^{n,n}, \quad n \geq 2.$$

Часть II. Асимптотические результаты метода последовательной верхней релаксации на измельчающихся сетках

Пусть дано матричное уравнение $Au = b$. Запишем матрицу A в виде $A = D - L - L^*$, где D и A являются эрмитовыми положительно определенными матрицами порядка n, а матрицы L и L^* размерности $n \times n$ являются строго нижней и строго верхней треугольными матрицами соответственно. Тогда стандартный метод последовательной верхней релаксации SOR задается уравнением

$$(D - \omega L)u^{(n+1)} = \{(1 - \omega)D + \omega L^*\}u^{(n)} + b, \tag{2.1}$$

которое легко может быть преобразовано (для $\omega \neq 0$) в

$$Au^{(n)} + \left(\frac{1}{\omega} D - L\right)\left(u^{(n+1)} - u^{(n)}\right) = b. \qquad (2.2)$$

Если $u^{(n)} = u + \varepsilon^{(n)}$, где $Au = b$, то получаем

$$A\varepsilon^{(n)} + \left(\frac{1}{\omega} D - L\right)\left(\varepsilon^{(n+1)} - \varepsilon^{(n)}\right) = 0. \qquad (2.3)$$

Предположим, что ε – собственный вектор $\mathcal{L}_\omega$, так что $\mathcal{L}_\omega \varepsilon = \lambda\varepsilon$. Тогда получаем

$$A\varepsilon = (1 - \lambda)\left(\frac{1}{\omega} D - L\right)\varepsilon. \qquad (2.4)$$

Предположим, что нам необходимо решить последовательность матричных задач, возникающих при использовании последовательности измельчающихся сеток в данной области для дифференциального оператора в частных производных. Отметим эту зависимость от шага сетки h, записав (2.4) в виде

$$A^h\varepsilon = (1 - \lambda^h)\left\{\frac{1}{\omega_h} D^h - L^h\right\}\varepsilon. \qquad (2.5)$$

Затем (см. Фикс и Ларсен [2.I]) положим

$$\omega_h = \frac{2}{1 + ch^\sigma}, \qquad (2.6)$$

где $c > 0$ и не зависит от h, а $\sigma > 0$ фиксировано.

Это означает, что как только константа c выбрана, ω_h для сетки с шагом h вычисляется из (2.6) и является оптимальным для каждого $h > 0$. Используя (2.6), соотношение (2.5) принимает вид

$$A^h\varepsilon = (1 - \lambda^h)\left\{\left(\frac{1}{2} D^h - L^h\right) + \frac{c}{2} h^\sigma D^h\right\}\varepsilon. \qquad (2.7)$$

Проиллюстрируем вышесказанное. Пусть A^h является обычным пятиточечным разностным оператором для Δu в ограниченной области из R^2 с краевыми условиями Дирихле, и пусть $D^h = 4I^h$. В этом случае

$$(\frac{1}{2} D^h - L^h)\varepsilon_{i,j} = 2\varepsilon_{i,j} - \varepsilon_{i-1,j} - \varepsilon_{i,j-1} = h(\varepsilon_x + \varepsilon_y)_{i,j} + O(h^2)$$

при $h \to 0$. Тогда, выбрав $\sigma = 1$ в (2.7), получаем

$$A^h\varepsilon \doteq h(1 - \lambda^h)\{\varepsilon_x + \varepsilon_y + 2c\varepsilon\}. \qquad (2.8)$$

Разделив на h^2, приходим к уравнению

$$-\Delta\varepsilon = \zeta\ \{\varepsilon_x + \varepsilon_y + 2c\varepsilon\}, \qquad (2.9)$$

где $\zeta \doteq \dfrac{1 - \lambda^h}{h}$.

Задача на собственные значения (2.9) не является самосопряженной и имеет комплексные собственные значения для достаточно малых $c > 0$. С другой стороны, для достаточно больших $c > 0$ задача на собственные значения (2.9) имеет наименьшее вещественное собственное значение $\zeta_1(c)$, которое должно быть связано со спектральным радиусом $\mathcal{L}_{\omega}^{(h)}$:

$$\zeta_1(c) = \frac{1 - \rho(\mathcal{L}_{\omega_h}^h)}{h} \quad \text{или} \quad \rho(\mathcal{L}_{\omega_h}^h) \doteq 1 - h\zeta_1(c). \qquad (2.10)$$

Эксперименты показали, что для достаточно больших c наименьшее вещественное собственное значение $\zeta_1(c)$, которое зависит от c, а не от h, действительно удовлетворяет второму соотношению (2.10). Более того, интересно отметить, что лучшим выбором константы c в (2.9) является тот, при котором $\zeta_1(c)$ является собственным значением кратности 2, а это в точности соответствует характеристике обычного оптимума ω при использовании двуциклических согласованно упорядоченных матриц. Еще более интересно то, что этот анализ применяется к методу SSOR и к дифференциальным уравнениям высших порядков, например, к бигармоническому уравнению.

Такой выбор формулы для ω_h в (2.6) был мотивирован работой Фикса и Ларсена [2.I]. Численные и теоретические результаты будут даны в [2.2].

Часть Ш. Строго неявные методы и метод сопряженных градиентов

В настоящее время, благодаря усилиям проф. Голуба, метод сопряженных градиентов для решения больших систем линейных уравнений $Ax = k$, где A – эрмитова положительно определенная матрица, вновь привлек внимание математиков. Метод сопряженных градиентов известен давно. Что же нового в развитии этого метода в настоящее время и почему результаты кажутся такими привлекательными?

Чтобы лучше ответить на этот вопрос, мы упомянем работу Мейеринка и Ван дер Форста [3.I], в которой предлагается использовать строго неявные методы сопряженных градиентов для решения эллиптических разностных уравнений. Это может быть описано следующим образом. Рассмотрим частичную факторизацию

$$A = T'T - C, \tag{3.1}$$

где матрица T является верхней треугольной и разреженной. Тогда матрица $(T'T)^{-1}$ рассматривается в качестве аппроксимации A^{-1}. Идея заключается в том, чтобы применить метод сопряженных градиентов к симметризуемой матрице

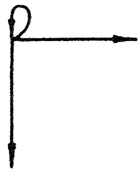
$$(T'T)^{-1}A \tag{3.2}$$

неявным образом. Если $T'T$ хорошо аппроксимирует матрицу A, то можно ожидать, что матрица $(T'T)^{-1}A$ имеет большое число собственных значений, близких к I, и что соответствующее число обусловленности $K((T'T)^{-1}A)$ должно быть существенно меньше, чем $K(A)$. Известно, что итерационные ошибки для метода сопряженных градиентов удовлетворяют неравенству

$$\|x_m - A^{-1}k\|_A \le c\left(\frac{1-\sqrt{K}}{1+\sqrt{K}}\right)^m \|x_0 - A^{-1}k\|_A. \tag{3.3}$$

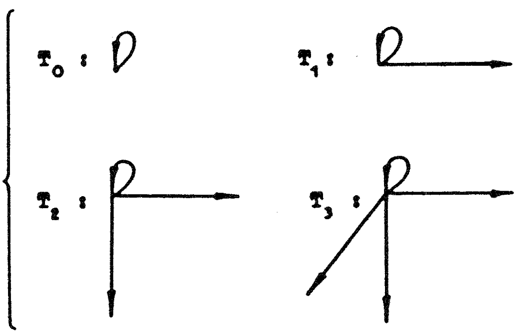
Фактически Мейеринк и Ван дер Форст [3.I] предложили часті ную декомпозицию матрицы A по Холесскому, что, как мне кажется, впервые было предложено в моей работе [3.2] в 1960 году и называлось простой факторизацией. Идея была графо-теоретической, и в [3.2] содержится следующее графо-представление

T:



(3.4)

как "кандидатура" для простой факторизации. Рассмотрим следу щие основные графо-теоретические определения разреженных вер них треугольных матриц:



(3.5)

Матрица T_2 рассматривается в работе Дюпона, Кендала и Р форда [3.3]. Интересно отметить, что если

$$A = T_i^t T_i - C_i, \tag{3.6}$$

то (3.6) является регулярным разбиением матрицы A (см. [3.2]) для каждого i = 0, I, 2, 3 при условии, что A –

вырожденная M - матрица.

Далее, поскольку матрица $(T_1^t T_1)^{-1}A$ имеет положительные собственные значения, пусть $[e_1^{(1)}\ e_2^{(1)}]$ будет наименьшим отрезком, содержащим собственные значения $(T_1^t T_1)^{-1}A$:

$$sp[(T_1^t\ T_1)^{-1}A] \subseteq [e_1^{(1)}, e_2^{(1)}], \qquad (3.7)$$

где $0 < e_1^{(1)} \le e_2^{(1)}$. Для пятиточечной дискретизации задач "пуассоновского" типа оказывается, что

$$e_2^{(0)}/e_1^{(0)} = O(h^{-2}) = e_2^{(1)}/e_1^{(1)}, \qquad (3.8)$$

тогда как (см. [3.3]) с другой стороны

$$e_2^{(2)}/e_1^{(2)} = O\ (h^{-1}). \qquad (3.9)$$

Основной причиной для улучшения оценки (3.9) по сравнению с (3.8) служит то, что матрица T_2 является двумерной неполной декомпозицией A по Холесскому, в то время как T_0 и T_1 не являются таковыми. Необходимо также упомянуть работу Чандра [3.4], где показано, что для таких модельных задач необходимо осуществить

$$\begin{cases} O(n^{1/2}\ln 1/\varepsilon) & \text{итераций неявного метода сопряженных градиентов, для уменьшения нормы начальной ошибки до } \varepsilon\text{;} \\ O(n^{5/2}\ln 1/\varepsilon) & \text{умножений при } n^2 \text{ узлов для уменьшения нормы первоначальной ошибки до } \varepsilon\text{.} \end{cases} \qquad (3.10)$$

Нас интересовало следующее. Дает ли переход от T_2 к T_3 в (3.5) соответствующий порядок улучшения по h по сравнению с собственным значением, найденным в (3.9)? Численные эксперименты проводились на ЭВМ CDC-7600 в Лаборатории Лоренс Ливермор. Заканчивая итерации при уменьшении невязок до 10^{-6} (в норме l_2), были получены следующие результаты:

n	Итерации, использующие матрицу T_2	Итерации, использующие матрицу T_3	Отношение
I0	I0	6	.60
20	I7	II	.65
30	24	I5	.63
40	30	I9	.63
50	37	22	.59

Таким образом, при использовании T_3 имеется улучшение простой факторизации по сравнению с факторизацией T_2, но отношение оказывается постоянным (не зависящим от h). Я подозреваю, что любая фиксированная схема факторизации T_i высшего порядка такова, что (см. (3.9)) $e_2^{(i)}/e_1^{(i)} = O(h^{-1})$ для $i \geq 2$, где, разумеется, константа при h^{-1} зависит от i.

Наконец, то, чего не хватает в анализе метода сопряженных градиентов, – это оценки, которая учитывала бы саму природу спектра оператора. Это может быть хорошей и плодотворной областью исследования в будущем.

Литература

1.1. G.Engel and Hans Schneider. The Hadamard-Fisher inequality for a class of matrices defined by eigenvalue monotonicity. Linear and Multilinear Algebra.

1.2. G.M.Engel and R.S.Varga. Minimal Gersgorin sets and ω-matrices. Linear and Multilinear Algebra, 5, 1977, pp. 1-10.

1.3. R.S.Varga. Minimal Gerschgorin sets. Pacific J. Math., 15, 1965, pp. 719-729.

1.4. R.S.Varga. A note on the open question on ω - and τ - matrices. Linear Algebra and Its Applications, 18, 1977, pp.45-52.

2.1. G.L.Fix and K.Larsen. On the convergence of SOR iterations for finite element approximations to elliptic boundary value problems. SIAM J. Numer. Anal. 8, 1971, pp. 536-547.

2.2. G.H.Rodrigus and R.S.Varga. The asymptotic convergence rates for SOR iterations for small meshes, with applications to finite element approximations. Lawrence Livermore Laboratory, California (to appear).

3.1. J.A.Meijerink and H.A.Van der Vorst. An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M - matrix. Math. of Comp., 31, 1977, pp. 148-162.

3.2. R.S.Varga. Factorization and normalized iterative methods. Boundary Problems in Differential Equations (R.E. Larsen, ed.), pp. 121-142, University of Wisconsin Press, Madison, 1960.

3.3. T.Dupont, R.P.Kendall and H.H.Rachford, Jr. An approximate factorization procedure for solving self-adjoint elliptic difference equations. SIAM J.Numer. Anal. 5, 1968, pp. 559-573.

3.4. R.Chandra, S.C.Eisenstat and M.H.Schultz. Conjugate gradient methods for partial differential equations. Dept. of Computer Science, Yale University Research Report No. 49.