

روش‌های تکراری تعمیم‌یافته برای حل مسئله نقطه زینی مضاعف

میکیل بنزی

دانشگاه اسکولا نرماله سوپریوره، ایتالیا

فاطمه پنجه‌علی‌بیک، سید حسن عزیزی چپرپردی، زهره روی‌گر

دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

پذیرش ۹۷/۰۵/۱۴

دریافت ۹۶/۰۸/۱۵

چکیده

در این مقاله، به تعمیم برخی از روش‌های تکراری ایستا در شکل بلوکی برای حل مسائل نقطه زینی مضاعف می‌پردازیم. برای این منظور ابتدا روش ژاکوبی را تعمیم داده و تحت شرایط خاص همگرایی آن را بررسی می‌کنیم. همچنین با اضافه کردن پارامتر تخفیف، شکل برونمایی شده روش ژاکوبی تعمیم یافته و همگرایی آن را نیز در نظر می‌گیریم. سپس به بررسی تعمیمی از روش گاوس-سیدل و آنالیز همگرایی آن تحت قید مناسبی می‌پردازیم. همچنین در روش مذکور تخفیف متوالی تعمیم یافته به همراه شرایط کافی همگرایی آن بررسی شده است. برای نشان دادن کارایی روش‌های ارائه شده به گزارش نتایج عددی برای حل مسئله نقطه زینی مضاعف، دارای کاربرد در مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع می‌پردازیم.

واژه‌های کلیدی: مسئله نقطه زینی مضاعف، روش بلوکی گاوس-سیدل، روش بلوکی فوق تخفیف متوالی، همگرایی، کریستال مایع.

مقدمه

دستگاه معادلات خطی زیر را در نظر بگیرید:

$$Au \equiv \begin{bmatrix} A & B^T & C^T \\ B & 0 & 0 \\ C & 0 & -D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} \equiv b, \quad (1)$$

که در آن $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ و $D \in \mathbb{R}^{p \times p}$ ماتریس‌های معین مثبت متقارن، $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ و $C \in \mathbb{R}^{p \times n}$ ($m \leq n$) به قسمی که B دارای رتبه سطری کامل است. دنباله‌ای از دستگاه‌های معادلات خطی از نوع (۱) در مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع^۱ با استفاده از روش اجزای متناهی^۲ ظاهر می‌شوند [۷].

دستگاه معادلات خطی (۱) را می‌توان به شکل مسئله نقطه زینی پایدار شده^۳ زیر در نظر گرفت:

$$\begin{bmatrix} A_{11} & C^T \\ C & -D \end{bmatrix} u = b,$$

که در آن

نویسنده مسئول f.beik@vru.ac.ir

1. Liquid crystal directors
2. Finite element
3. Stabilized saddle point problem

$$A_{11} = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix},$$

دارای ساختار مشابهی با ماتریس ضرایب متناظر با مسئله نقطه زینی^۱ است. مسئله نقطه زینی دارای کاربردهای فراوانی در زمینه‌های مختلف از جمله بهینه سازی مقید^۲، محاسبات علمی^۳ و مهندسی است. برای مثال، گسسته سازی معادلات استوکس^۴ و ناور-استوکس^۵ با استفاده از روش‌های المان محدود منجر به مسائل نقطه زینی می‌شود که بلوک (۲.۲) در ماتریس ضرایب آن‌ها به ترتیب صفر و ناصفر است. مرور کاملی روی تحقیقات انجام شده بر عملکرد روش‌های تکراری برای حل مسائل نقطه زینی تا سال ۲۰۰۵ انجام شده است [۴]. هم‌چنین برای کاربردهای روش‌های تکراری در حل مسائل نقطه زینی پایدار شده می‌توان به [۲] و منابع آن مراجعه کرد.

پیش از ادامه بحث، به معرفی نمادهای استفاده شده در طول مقاله می‌پردازیم. مجموعه مقادیر ویژه (طیف) ماتریس دلخواه مربعی W را با نماد $\sigma(W)$ نشان می‌دهیم. هم‌چنین اگر تمامی مقادیر ویژه W حقیقی باشند، $\lambda_{\min}(W)$ و $\lambda_{\max}(W)$ به ترتیب نمایانگر بزرگ‌ترین و کوچک‌ترین مقدار ویژه W است. به علاوه، بزرگ‌ترین مقدار ویژه W از لحاظ اندازه را با $\rho(W)$ نشان داده و آن را شعاع طیفی W می‌نامیم. برای ماتریس (نیمه) معین مثبت متقارن W از نماد $W \succ 0$ ($W \succeq 0$) استفاده می‌کنیم. هم‌چنین برای ماتریس‌های مربعی هم‌بند W_1 و W_2 منظور از $W_1 \succ W_2$ ($W_1 \succeq W_2$) این است که $W_1 - W_2 \succ 0$ ($W_1 - W_2 \succeq 0$). برای بردارهای x ، y و z از بُعدهای n ، m و p ، نماد متلب^۶ $(x; y; z)$ بردار ستونی از بُعد $n + m + p$ را نشان می‌دهد.

قضیه ۱ شرط لازم و کافی برای نامنفرد بودن ماتریس ضرایب دستگاه معادلات خطی (۱) را ارائه می‌دهد.

قضیه ۱. فرض کنید $A \succ 0$ و $D \succ 0$. در این صورت A معکوس پذیر است اگر و تنها اگر B دارای رتبه سطر کامل باشد [۱].

هدف اصلی این مقاله تعمیم روش‌های تکراری ایستا برای حل مسئله نقطه زینی مضاعف (۱) است. برای این

منظور، ابتدا تجزیه زیر را برای ماتریس A در نظر می‌گیریم:

$$A = D - \mathcal{L} - \mathcal{U},$$

که در آن

$$D = \begin{bmatrix} A & B^T & 0 \\ B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -D \end{bmatrix}, \quad \mathcal{L} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -C & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{U} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -C^T \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

تجزیه $A = M - \mathcal{N}$ را شکافت می‌نامیم هرگاه \mathcal{M} معکوس پذیر باشد. در حالت کلی، روشی تکراری برای حل

$Au = b$ با در نظر گرفتن شکافت $A = M - \mathcal{N}$ ساخته می‌شود. به عبارت دقیق‌تر، روشی تکراری پایه برای حل

$Au = b$ ، دنباله‌ای از تقریب‌ها را با شکل بازگشتی زیر تولید می‌کند:

$$u_{k+1} = \mathcal{G}u_k + \mathcal{M}^{-1}b, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2)$$

1. Saddle point problem
2. Constraint optimization
3. Scientific computing
4. Stokes
5. Navier-Stokes
6. MATLAB

که در آن $\mathcal{G} = \mathcal{M}^{-1}\mathcal{N}$ ماتریس تکرار نامیده می‌شود و بردار آغازین u_0 (به‌طور دلخواه) داده شده است. می‌توان دید که $\rho(\mathcal{G}) < 1$ یک شرط لازم و کافی برای همگرایی روش تکراری (۲) به‌ازای هر بردار آغازین دلخواه است [۸].

چنان‌که اشاره شد در به‌کارگیری روش‌های عددی برای مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع به حل دستگاه معادلات خطی به‌صورت (۱) نیاز داریم. با بررسی مشاهدات عددی انجام شده روی ماتریس‌های موجود برای ابعاد کوچک به‌نظر می‌رسد شرط $A \succ C^T D^{-1} C$ برای هر بُعد دلخواه مسئله نقطه زینی مضاعف متناظر با مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع برقرار است [۷]. از این رو نتایج نظری مقاله به دو قسمت اصلی تقسیم شده است. بعد از اتمام این بخش، در بخش دوم فرض می‌کنیم $A \succ C^T D^{-1} C$ و به تعمیم روش ژاکوبی^۱ و نسخه برون‌یابی شده آن می‌پردازیم. هم‌چنین در ادامه بخش دوم، یک روش تک پارامتری به‌نام روش گاوس-سیدل تعمیم یافته^۲ را ارائه داده و همگرایی آن را بررسی می‌کنیم. در بخش سوم، محدودیت $A \succ C^T D^{-1} C$ را حذف کرده و به ارائه روش مذکور و تخفیف متوالی تعمیم‌یافته^۳ و بررسی شرایط کافی برای همگرایی آن می‌پردازیم. برای نشان دادن کارآمدی روش‌های تکراری ارائه شده و پیش‌شرط‌سازهای به‌دست آمده از شکافت آن‌ها، نتایج عددی در بخش چهارم گزارش شده است. سرانجام مقاله را با جمع‌بندی مختصری از نتایج به‌دست آمده در طول کار و پیشنهاد برای کارهای آینده، در بخش پنجم خاتمه می‌دهیم.

تعمیم‌هایی از روش‌های ژاکوبی و گاوس-سیدل

در این بخش فرض می‌کنیم برای بلوک‌های ماتریس A داشته باشیم $A \succ C^T D^{-1} C$. ابتدا روش ژاکوبی را برای حل دستگاه معادلات خطی (۱) تعمیم می‌دهیم. سپس، به‌طور خلاصه اشاره می‌کنیم که با به‌کار بردن نسخه برون‌یابی شده این روش، می‌توان بعد از حذف شرط $A \succ C^T D^{-1} C$ نیز روشی همگرا برای حل (۱) ارائه داد. سرانجام روش GGS برای حل (۱) ارائه می‌شود که وابسته به یک پارامتر ثابت است و در حالت خاص برای انتخاب بهینه این پارامتر توضیح کوتاهی داده شده است.

برای ارائه روش ژاکوبی تعمیم‌یافته^۴، از شکافت $\mathcal{A} = \mathcal{M}_J - \mathcal{N}_J$ که در آن $\mathcal{M}_J = \mathcal{D}$ و $\mathcal{N}_J = \mathcal{L} + \mathcal{U}$ استفاده می‌کنیم. بنابراین روش تکراری GJ بدین صورت است:

$$u_{k+1} = \mathcal{G}_J u_k + \mathcal{M}_J^{-1} b, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

که در آن بردار آغازین داده شده است و $\mathcal{G}_J = \mathcal{M}_J^{-1} \mathcal{N}_J$.

در ادامه شرط کافی برای همگرایی روش تکراری GJ ارائه داده شده است. برای این منظور، ابتدا قضیه ۲ را یادآوری می‌کنیم.

قضیه ۲. (۷.۷.۳ قضیه از [۶]) فرض کنید A و B ماتریس‌های $n \times n$ حقیقی و متقارن باشند به‌طوری‌که A معین مثبت و B نیمه معین مثبت است. در این صورت $A \succeq B$ اگر و تنها اگر $\rho(A^{-1}B) \leq 1$ و $A \succ B$ اگر و تنها اگر $\rho(A^{-1}B) < 1$.

قضیه ۳. فرض کنید $A \succ 0$ ، $D \succ 0$ و B دارای رتبه سطری کامل باشد. اگر $A \succ C^T D^{-1} C$ آن‌گاه روش GJ به‌ازای هر بردار آغازین دلخواه به جواب مسئله (۱) همگراست.

1. Jacobi
2. Generalized Gauss-Seidel (GGS)
3. Generalized successive overrelaxation (GSOR)
4. Generalized Jacobi (GJ)

برهان. طبق فرض می‌توان نتیجه گرفت $C^T D^{-1} C \succeq 0$ و $A^{-1} \succ 0$ ، بنابراین مقادیر ویژه $\mathcal{G} = A^{-1} C^T D^{-1} C$ همگی مثبت‌اند [۶]. اکنون فرض کنید λ یک مقدار ویژه دلخواه از $\mathcal{N}_J^{-1} \mathcal{N}_J$ باشد. در این صورت یک بردار ویژه $(x; y; z)$ وجود دارد به‌قسمی که $\mathcal{G}_J(x; y; z) = \lambda(x; y; z)$ یا به‌طور معادل $\mathcal{N}_J(x; y; z) = \lambda \mathcal{M}_J(x; y; z)$. بنابراین:

$$\lambda Ax + \lambda B^T y = -C^T z, \quad (۳)$$

$$\lambda Bx = 0, \quad (۴)$$

$$-\lambda Dz = -Cx. \quad (۵)$$

به‌وضوح $\lambda = 0$ مقدار ویژه \mathcal{G}_J متناظر با بردار ویژه $(0; y; 0)$ است که در آن $y \in \mathbb{R}^n$ بردار دلخواه نا صفر است. اکنون در ادامه فرض می‌کنیم $\lambda \neq 0$. در این حالت، نشان می‌دهیم بردار x ناصفر است. برای این منظور فرض کنید $x = 0$ ، بنابراین از (۵) با توجه به معکوس‌پذیر بودن D نتیجه می‌گیریم $z = 0$ و سپس از (۳) با توجه به کامل بودن رتبهٔ سطری B نتیجه می‌گیریم $y = 0$ که با $(x; y; z) \neq 0$ در تناقض است. چنان‌که دیدیم زمانی که λ ناصفر است، بردار x نیز ناصفر خواهد بود. از این رو، در ادامه بدون کاسته شدن از کلیت مسئله فرض می‌کنیم $x^* x = 1$. اکنون با توجه به رابطهٔ (۴)، می‌توان نتیجه گرفت $Bx = 0$. با ضرب طرفین رابطهٔ (۳) در λx^* داریم:

$$\lambda^2 x^* Ax = -\lambda x^* C^T z.$$

با محاسبهٔ λz از معادله (۵) و جای‌گذاری آن در معادله مذکور به‌دست می‌آوریم $\lambda^2 x^* Ax = -x^* C^T D^{-1} Cx$. بنابراین برای مقادیر ویژه ناصفر λ داریم $\lambda^2 = -(x^* Ax)^{-1} (x^* C^T D^{-1} Cx)$. با توجه به فرض و قضیهٔ ۳ داریم:

$$|\lambda|^2 \leq \rho(A^{-1} C^T D^{-1} C) < 1,$$

یا به‌طور معادل $|\lambda| < 1$ که این حکم را ثابت می‌کند.

در ادامه خواهیم دید شرط $A \succ C^T D^{-1} C$ را می‌توان حذف کرد و با اصلاح روش GJ روشی تکراری همگرا برای حل (۱) ارائه داد. برای این منظور، شکل برون‌یابی شده روش GJ را بدین صورت در نظر می‌گیریم:

$$u_{k+1} = (1 - \theta)u_k + \theta \mathcal{M}_J^{-1}(\mathcal{N}_J u_k + b), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

که در آن پارامتر $\theta > 0$ داده شده است.

قضیهٔ ۴ شرط کافی برای همگرایی روش ژاکوبی تعمیم‌یافته برون‌یابی شده^۱ را ارائه می‌دهد. لازم به ذکر است که این روش را می‌توان تعمیمی از روش ژاکوبی برون‌یابی شده [۹] دانست.

قضیهٔ ۴. روش EGJ برای هر بردار آغازین دلخواه همگراست اگر

$$0 < \theta < \min \left\{ \frac{1}{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}, \frac{2}{1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}} \right\},$$

که در آن $\mathcal{G} = A^{-1} C^T D^{-1} C$.

برهان. با استفاده از شکل تکراری روش EGJ، می‌توان دید ماتریس تکرار روش بدین صورت است:

$$H = (1 - \theta)I + \theta \mathcal{M}_J^{-1} \mathcal{N}_J.$$

بنابراین مقادیر ویژه ماتریس تکرار برابر است با $\mu = (1-\theta) \pm \theta i\eta$ که $\mu \in \sigma(\mathcal{M}_J^{-1} \mathcal{N}_J)$. چنان‌که در اثبات قضیه ۳ دیده شد، یک بردار $x \neq 0$ وجود دارد که

$$\eta^2 = \frac{x^* C^T D^{-1} C x}{x^* A x}.$$

یادآوری می‌کنیم که A و D ماتریس‌های معین مثبت متقارن هستند، بنابراین عبارت سمت راست در رابطه مذکور نامنفی است. با به‌کار بردن محاسبات ساده و با توجه به این‌که ماتریس A معین مثبت است، داریم:

$$\max_{x \neq 0} \frac{x^* C^T D^{-1} C x}{x^* A x} = \lambda_{\max}(\mathcal{G}).$$

ابتدا توجه کنید $|\mu| \geq |1-\theta|$ ، از این‌رو اگر $|1-\theta| \geq 1$ (یا به‌طور معادل $\theta \notin (0, 2)$) آن‌گاه $|\mu| \geq 1$. بنابراین برای همگرایی (و برقراری شرط $|\mu| < 1$) لازم است پارامتر θ در بازه $(0, 2)$ انتخاب شود. باید توجه شود که شرط $\theta \in (0, 2)$ یک شرط کافی برای همگرایی نیست و در ادامه نشان می‌دهیم با توجه به فرض‌های قضیه داریم $|\mu| < 1$. تأکید می‌کنیم طبق فرض داریم:

$$0 < \theta < \frac{2}{1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}},$$

که ایجاب می‌کند $0 < \theta < 2$.

اکنون دو حالت زیر را در نظر می‌گیریم و در هر دو حالت نشان می‌دهیم $|\mu| < 1$.

• اگر $1 < \theta < 2$ آن‌گاه داریم:

$$\begin{aligned} |\mu| &\leq |1-\theta| + \theta\eta, \\ &\leq \theta - 1 + \theta \left(\max_{x \neq 0} \frac{x^* C^T D^{-1} C x}{x^* A x} \right)^{\frac{1}{2}}, \\ &= -1 + \theta(1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}), \end{aligned}$$

با توجه به فرض، چون

$$0 < \theta < \frac{2}{1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}},$$

می‌توان نتیجه گرفت $-1 + \theta(1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}) < 1$ که نشان می‌دهد برای $1 < \theta < 2$ داریم $|\mu| < 1$.

• اگر $0 < \theta < 1$ آن‌گاه داریم:

$$\begin{aligned} |\mu|^2 &= (1-\theta)^2 + \theta^2 \eta^2, \\ &< (1-\theta) + \theta^2 \eta^2, \\ &\leq (1-\theta) + \theta^2 \max_{x \neq 0} \frac{x^* C^T D^{-1} C x}{x^* A x}, \\ &= 1 + \theta(-1 + \theta \lambda_{\max}(\mathcal{G})). \end{aligned}$$

با توجه به فرض

$$0 < \theta < \frac{1}{\lambda_{\max}(\mathcal{G})},$$

بنابراین می‌توان نتیجه گرفت $-1 + \theta \lambda_{\max}(\mathcal{G}) < 0$ که نشان می‌دهد برای $0 < \theta < 1$ داریم $|\mu| < 1$.

تذکره ۱. فرض کنید $A \succ C^T D^{-1} C$ یا به طور معادل $\lambda_{\max}(\mathcal{G}) = \rho(\mathcal{G}) < 1$. نشان می‌دهیم

$$\min \left\{ \frac{1}{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}, \frac{2}{1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}} \right\} = \frac{2}{1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}}.$$

برای این منظور کافی است ثابت کنیم:

$$\frac{2}{1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}} < \frac{1}{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}.$$

برای سادگی کار قرار می‌دهیم $\tau = \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}$. بنابراین رابطه مذکور را می‌توان به صورت معادل زیر نوشت:

$$2\tau^2 < 1 + \tau,$$

اکنون با تعیین علامت معادله درجه دوم $y(\tau) = 2\tau^2 - \tau - 1$ ، به راحتی می‌توان دید که $y(\tau)$ به ازای $-0.5 < \tau < 1$ منفی است. با توجه به این که $\tau = \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})} = \sqrt{\rho(\mathcal{G})} < 1$ داریم $0 < \tau < 1$. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که:

$$0 < \theta < \frac{2}{1 + \sqrt{\lambda_{\max}(\mathcal{G})}},$$

یک شرط کافی برای همگرایی روش ژاکوبی تعمیم یافته است.

در ادامه روش GGS را با استفاده از شکافت زیر ارائه داده و همگرایی روش را بررسی می‌کنیم. فرض کنید:

$$A = \mathcal{M}_{\text{GGS}} - \mathcal{N}_{\text{GGS}},$$

به قسمی که،

$$\mathcal{M}_{\text{GGS}} = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ B & -\frac{1}{\alpha}Q & 0 \\ C & 0 & -D \end{bmatrix},$$

که در آن پارامتر مثبت α و $Q \succ 0$ داده شده است. بنابراین روش تکراری GGS بدین صورت تکراری است:

$$u_{k+1} = \mathcal{G}_{\text{GGS}} u_k + \mathcal{M}_{\text{GGS}}^{-1} b, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

که در آن $\mathcal{G}_{\text{GGS}} = \mathcal{M}_{\text{GGS}}^{-1} \mathcal{N}_{\text{GGS}}$ نمایانگر ماتریس تکرار روش است.

لم ۱. [۱۰] معادله درجه دوم $z^2 - rz + s = 0$ که در آن r و s حقیقی هستند، دارای دو ریشه z_1 و z_2 با شرایط

$$z_0 = \max\{|z_1|, |z_2|\} < 1 \text{ است اگر و تنها اگر } |s| < 1 \text{ و } |r| < 1 + s.$$

قضیه ۵. فرض کنید $A \succ 0, D \succ 0$ و B دارای رتبه سطری کامل، $A \succ C^T D^{-1} C$ و

$$0 < \alpha < \frac{2 - 2\lambda_{\max}(\mathcal{G})}{\lambda_{\max}(A^{-1}B^T Q^{-1}B)}, \quad (۶)$$

که در آن $\mathcal{G} = A^{-1}C^T D^{-1}C$. اگر $\mathcal{G}_{\text{GGS}} = \mathcal{M}_{\text{GGS}}^{-1} \mathcal{N}_{\text{GGS}}$ در این صورت $\rho(\mathcal{G}_{\text{GGS}}) < 1$.

برهان. فرض کنید $\lambda \in \sigma(\mathcal{G}_{\text{GGS}})$. بنابراین بردار ناصفر $(x; y; z)$ وجود دارد به قسمی که

$$-B^T y - C^T z = \lambda Ax, \quad (۷)$$

$$-\frac{1}{\alpha}Qy = \lambda \left(Bx - \frac{1}{\alpha}Qy \right), \quad (۸)$$

$$0 = \lambda(Cx - Dz). \quad (۹)$$

توجه کنید $\lambda = 0$ یک مقدار ویژه \mathcal{G}_{GGS} متناظر با بردار ویژه $(x; 0; z)$ است که برداری دلخواه و $z = 0$ یا در حالتی که C دارای رتبه سطری ناقص است z می‌تواند یک بردار ناصفر متعلق به $\ker(C^T)$ باشد. در ادامه فرض می‌کنیم $\lambda \neq 0$. در این حالت می‌توان نتیجه گرفت $x \neq 0$. در غیر این صورت با توجه به این که $D > 0$ و B دارای رتبه سطری کامل است، $x = 0$ ایجاب می‌کند $y = 0$ و $z = 0$ که این با فرض بردار ویژه بودن $(x; y; z)$ متناقض است.

با استفاده از رابطه (۸) به دست می‌آوریم:

$$\frac{\lambda - 1}{\alpha} y = \lambda Q^{-1} Bx, \quad (10)$$

با محاسبه بردار z از رابطه (۹) داریم:

$$z = D^{-1} Cx, \quad (11)$$

اکنون با ضرب رابطه (۷) در $\frac{\lambda - 1}{\alpha}$ و جای‌گذاری z ، نتیجه می‌گیریم:

$$\frac{\lambda(\lambda - 1)}{\alpha} Ax = \frac{(1 - \lambda)}{\alpha} B^T y - \frac{(\lambda - 1)}{\alpha} C^T D^{-1} Cx. \quad (12)$$

رابطه (۱۲) را می‌توان بدین صورت بازنویسی کرد:

$$\frac{\lambda(\lambda - 1)}{\alpha} Ax = -\lambda B^T Q^{-1} Bx - \frac{(\lambda - 1)}{\alpha} C^T D^{-1} Cx.$$

با ضرب رابطه مذکور از سمت چپ در αx^* ، معادله درجه دوم (۱۳) به دست می‌آید:

$$\lambda^2 + (-1 + \alpha p + q)\lambda - q = 0, \quad (13)$$

که در آن

$$p = \frac{x^* B^T Q^{-1} Bx}{x^* Ax}, \quad q = \frac{x^* C^T D^{-1} Cx}{x^* Ax}. \quad (14)$$

با به‌کارگیری محاسبات جبری ساده، می‌توان نتیجه گرفت:

$$p \leq \max_{x \neq 0} \frac{x^* B^T Q^{-1} Bx}{x^* Ax} = \lambda_{\max}(A^{-1} B^T Q^{-1} B),$$

و همچنین،

$$q \leq \max_{x \neq 0} \frac{x^* C^T D^{-1} Cx}{x^* Ax} = \lambda_{\max}(\mathcal{G}).$$

با توجه به قضیه ۲، شرط $A \succ C^T D^{-1} C$ نتیجه می‌دهد $\rho(\mathcal{G}) < 1$. حال با به‌کارگیری نامساوی‌های مذکور، می‌توان دید $\rho(\mathcal{G}) < 1$ ایجاب می‌کند $q < 1$. همچنین $q < 1$ و رابطه (۶) شرط کافی برای برقراری نامساوی $|-1 + \alpha p + q| < 1 - q$ است. اکنون با به‌کارگیری لم قبل می‌توان حکم را نتیجه گرفت.

تذکر ۲. تحت شرایط قضیه قبل، ریشه‌های معادله درجه دوم (۱۳) دارای این شکل کلی است:

$$\frac{(1 - \alpha p - q) \pm \sqrt{(-1 + \alpha p + q)^2 + 4q}}{2},$$

که در آن p و q به ترتیب در (۱۴) تعریف شده‌اند. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت تمامی مقادیر ویژه \mathcal{G}_{GGS} حقیقی‌اند. فرض کنید:

$$\alpha = \frac{1 - \lambda_{\max}(\mathcal{G})}{\lambda_{\max}(A^{-1}B^T Q^{-1}B)}$$

توجه کنید در حالت خاص، برای $Q = BA^{-1}B^T$ داریم $\lambda_{\max}(A^{-1}B^T Q^{-1}B) = 1$. در این حالت تست‌های عددی انجام شده، نشان می‌دهد $\alpha^* = 1 - \lambda_{\max}(\mathcal{G})$ تقریب بسیار خوبی برای مقدار بهینه α است. به‌ویژه برای مسئله متناظر با مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع، مشاهده می‌شود مقدار پارامتر α^* برای تمامی ابعاد تقریباً ثابت باقی می‌ماند. بنابراین در این حالت، مقدار شبه بهینه α^* با محاسبه $\lambda_{\max}(\mathcal{G})$ برای ابعاد کوچک محاسبه می‌شود. با توجه به این که محاسبه $\lambda_{\max}(\mathcal{G})$ برای ابعاد بزرگ بسیار پرهزینه است، از مقدار ثابت محاسبه شده برای ابعاد کوچک می‌توان استفاده کرد، برای جزئیات بیش‌تر به قسمت نتایج عددی مراجعه کنید.

شکل تعمیم‌یافته روش فوق تخفیف متوالی

در این بخش روش GSOR را برای حل دستگاه معادلات خطی (۱) ارائه داده و به بررسی همگرایی آن می‌پردازیم. برای این منظور ابتدا شکافت زیر را برای ماتریس A در نظر می‌گیریم:

$$A = \mathcal{M}_{\text{GSOR}} - \mathcal{N}_{\text{GSOR}}, \quad (15)$$

به‌قسمی که

$$\mathcal{M}_{\text{GSOR}} = \frac{1}{\omega}(D - \omega\mathcal{L}), \quad \mathcal{N}_{\text{GSOR}} = \frac{1}{\omega}((1-\omega)D + \omega\mathcal{U}).$$

که در آن پارامتر $\omega \neq 0$ داده شده است. بنابراین روش تکراری GSOR با قرار دادن شکافت (۱۵) بدین صورت به‌دست می‌آید:

$$u_{k+1} = \mathcal{G}_{\text{GSOR}} u_k + \mathcal{M}_{\text{GSOR}}^{-1} b, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (16)$$

که بردار آغازین u_0 داده شده است و $\mathcal{G}_{\text{GSOR}} = \mathcal{M}_{\text{GSOR}}^{-1} \mathcal{N}_{\text{GSOR}}$.

فرض کنید k مرحله ($k \geq 1$) از روش (۱۶) انجام شده باشد. در عمل برای محاسبه تقریب $(k+1)$ ام به‌ترتیب این مراحل را انجام می‌دهیم:

- محاسبه بردارهای r_1 و r_2 بدین‌صورت:

$$r_1 = (1-\omega)Ax_k + (1-\omega)B^T y_k - \omega C^T z_k + \omega b_1,$$

$$r_2 = (1-\omega)Bx_k + \omega b_2,$$

- محاسبه بردارهای x_{k+1} و y_{k+1} با حل این دستگاه‌ها:

$$BA^{-1}B^T y_{k+1} = BA^{-1}r_1 - r_2,$$

$$Ax_{k+1} = r_1 - B^T y_{k+1},$$

- محاسبه بردار r_3 بدین‌صورت:

$$r_3 = \omega Cx_{k+1} + (1-\omega)Dz_k - \omega b_3,$$

- یافتن بردار z_{k+1} با حل دستگاه معادلات خطی $Dz_{k+1} = r_3$.

اکنون قضیه ۶ را درباره مقادیر ویژه ماتریس تکرار روش GSOR ثابت می‌کنیم. در ادامه خواهیم دید که این قضیه نقش کلیدی در به‌دست آوردن شرط کافی برای همگرایی این روش دارد.

قضیه ۶. فرض کنید $D \succ 0, A \succ 0$ و B دارای رتبهٔ سطری کامل باشد و $\lambda \in \sigma(\mathcal{G}_{\text{GSOR}})$ که در آن $\mathcal{G}_{\text{GSOR}}$ ماتریس تکرار روش GSOR است. در این صورت $\lambda = 1 - \omega$ ، یا به ازای $\lambda \neq 1 - \omega$ یک پارامتر $\mu > 0$ وجود دارد به‌قسمی که:

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = -\omega^2 \lambda \mu. \quad (17)$$

برهان. فرض کنید $\lambda \in \sigma(\mathcal{G}_{\text{GSOR}})$ متناظر با بردار ویژه $(x; y; z)$ باشد. در این صورت:

$$\mathcal{N}_{\text{GSOR}}(x; y; z) = \lambda \mathcal{M}_{\text{GSOR}}(x; y; z),$$

یا به‌طور معادل داریم:

$$(1 - \omega)Ax + (1 - \omega)B^T y - \omega C^T z = \lambda Ax + \lambda B^T y, \quad (18)$$

$$(1 - \omega)Bx = \lambda Bx, \quad (19)$$

$$-(1 - \omega)Dz = \lambda \omega Cx - \lambda Dz. \quad (20)$$

به‌وضوح $\lambda = 1 - \omega$ می‌تواند مقدار ویژه $\mathcal{G}_{\text{GSOR}}$ متناظر با بردار ویژه $(0; y; 0)$ باشد که در آن y یک بردار ناصفر است. بنابراین در ادامه بدون کاسته شدن از کلیت مسئله فرض می‌کنیم $\lambda \neq 1 - \omega$. از رابطه (۲۰) نتیجه می‌گیریم:

$$z = \frac{\lambda \omega}{\lambda + \omega - 1} D^{-1} Cx. \quad (21)$$

از طرفی با توجه به رابطه (۱۹) و فرض $\lambda \neq 1 - \omega$ داریم $Bx = 0$.

اگر $\lambda \neq 1 - \omega$ ، می‌توان نتیجه گرفت بردار x ناصفر است. زیرا در غیر این‌صورت نامفرد بودن D و رابطه (۲۰) نتیجه می‌دهد $z = 0$. همچنین، از رابطه (۱۸) با توجه به کامل بودن رتبهٔ سطری B می‌توان نتیجه گرفت $y = 0$. به‌طور خلاصه، فرض‌های $x = 0$ و $\lambda \neq 1 - \omega$ ایجاب می‌کند $(x; y; z) = (0; 0; 0)$ که این برخلاف فرض بردار ویژه بودن $(x; y; z)$ است، بنابراین x یک بردار ناصفر است.

با ضرب طرفین (۱۸) از سمت چپ در x^* و جایگذاری z از رابطه (۲۱) داریم:

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = -\omega^2 \lambda \mu,$$

که در آن

$$\mu = \frac{x^* C^T D^{-1} Cx}{x^* Ax}.$$

اکنون با استفاده از قضیه ۶، می‌توان ω را طوری تعیین کرد که روش GSOR به‌ازای هر بردار آغازین دلخواه همگرا باشد.

قضیه ۷. فرض کنید $D \succ 0, A \succ 0$ و B دارای رتبهٔ سطری کامل باشد. روش GSOR برای هر بردار آغازین دلخواه همگراست اگر

$$0 < \omega < \frac{2}{1 + \sqrt{\rho(\mathcal{G})}},$$

که در آن $\mathcal{G} = A^{-1} C^T D^{-1} C$.

برهان. فرض کنید $\lambda \in \sigma(\mathcal{G}_{\text{GSOR}})$ ، کافی است نشان دهیم $|\lambda| < 1$. با توجه به فرض می‌توان دید $0 < \omega < 2$. بنابراین اگر $\lambda = 1 - \omega$ به‌راحتی می‌توان نتیجه گرفت $|\lambda| < 1$. به‌عبارت دیگر اگر $\lambda = 1 - \omega$ حکم برقرار

است. در ادامه، فرض می‌کنیم $\omega - 1 \neq \lambda$. در این حالت با توجه به قضیه ۶ یک پارامتر $\mu > 0$ وجود دارد به‌قسمی- که μ و λ در رابطه (۱۷) صدق می‌کنند. با ساده کردن رابطه (۱۷) به‌دست می‌آوریم:

$$\lambda^2 + (\omega^2 \mu + 2\omega - 2)\lambda + (\omega - 1)^2 = 0. \quad (22)$$

با توجه به لم ۱ می‌توان نتیجه گرفت اگر

$$|\omega - 1| < 1, \quad (23)$$

و

$$|\omega^2 \mu + 2\omega - 2| < 1 + (\omega - 1)^2, \quad (24)$$

آن‌گاه $|\lambda| < 1$. چنان‌که قبلاً اشاره شد رابطه (۲۳) برقرار است اگر و تنها اگر $\omega \in (0, 2)$. رابطه (۲۴) معادل است با

$$-\omega^2 + 2\omega - 2 < \omega^2 \mu + 2\omega - 2 < \omega^2 - 2\omega + 2. \quad (25)$$

به‌وضوح سمت چپ نامساوی (۲۵) برقرار است. با توجه به فرض $\omega^2 \rho(G) < (\omega - 2)^2$ و از طرفی $\mu < \rho(G)$ ، از این رو می‌توان دید:

$$\omega^2 \mu < \omega^2 \rho(G) < (\omega - 2)^2.$$

رابطه مذکور نتیجه می‌دهد $\omega^2 \mu < (\omega - 2)^2$ ، یا به‌طور معادل

$$\omega^2 \mu + 2\omega - 2 < \omega^2 - 2\omega + 2,$$

که نشان می‌دهد سمت راست رابطه (۲۵) برقرار است و بنابراین می‌توان حکم را نتیجه گرفت.

تذکره ۳. نتایج عددی امتحان شده نشان می‌دهد اگر $A \succ C^T D^{-1} C$ آن‌گاه

$$\tilde{\omega} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 + \rho(G)}},$$

تقریب خوبی برای مقدار پارامتر بهینه تجربی به‌دست آمده روش GSOR برای حل مسئله نقطه زینی مضاعف است. لازم به‌ذکر است مسئله نقطه زینی مضاعف متناظر با مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع در شرط $A \succ C^T D^{-1} C$ صدق می‌کند و چنان‌که در تذکره ۲ اشاره شد مقدار $\rho(G)$ تقریباً برای تمامی ابعاد این نوع مسئله ثابت می‌ماند.

نتایج عددی

تمام نتایج عددی گزارش شده در این بخش، روی کامپیوتر شخصی (با مشخصات حافظه ۸ گیگا بیتی، پردازشگر ۵ هسته‌ای، ویندوز ۶۴ بیتی) و با استفاده از نرم‌افزار متلب، نسخه 2018a انجام شده است. ابتدا به‌توضیح مختصری در مورد نحوه ظهور مسئله نقطه زینی مضاعف (۱) در مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع می‌پردازیم. در مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع به کمینه‌سازی تابعی (های) انرژی آزاد^۲ بدین‌صورت نیاز داریم:

$$\mathcal{F}[u, v, w, U] = \frac{1}{2} \int_0^1 [(u_z^2 + v_z^2 + w_z^2) - \alpha^2 (\beta + w^2) U_z^2] dz. \quad (26)$$

در رابطه مذکور u, v, w و U توابعی از $z \in [0, 1]$ است که در قیود مناسبی صدق می‌کنند^۳، پارامترهای مثبت α

1. 8.00GB RAM, i5core, GHz 2.45, 64-bit
2. Free energy functional

۳ فرض کنید f تابعی از z باشد، در این‌صورت مشتق f نسبت به z را با f_z نشان می‌دهیم.

و β داده شده‌اند. با استفاده از شکل تفاضلات متناهی، ابتدا رابطه (۲۶) گسسته‌سازی شده، سپس با اعمال قیود مورد نیاز برای کمینه‌سازی و به‌کاربردن روش ضرایب لاگرانژ، تابع لاگرانژین^۱ به‌دست می‌آید. به‌منظور کمینه‌سازی (۲۶) روش نیوتن برای حل مسئله غیرخطی $\nabla L = 0$ به‌کار برده می‌شود که در آن L نمایانگر تابع لاگرانژین است. در نهایت برای به‌کارگیری روش نیوتن در هر گام نیاز به حل یک دستگاه معادلات خطی داریم که ماتریس ضرایب آن، هسین^۲ تابع L (در یک نقطه خاص) است و دارای شکل بلوکی یکسانی مانند A است. به‌طور خلاصه، در واقع در هر گام از روش نیوتن، به حل دستگاه معادلات خطی به‌صورت (۱) نیاز داریم. در ساخت ماتریس‌ها، برای α و β مقادیر $\alpha = 0.5\alpha_c$ و $\beta = 0.5$ استفاده شده است که در آن $\alpha_c \approx 2.721$ ، برای جزئیات بیشتر به [۷] رجوع شود. در ادامه ابتدا روش‌های GGS و GSOR را برای ابعاد مختلف به‌کار می‌بریم. سپس به بررسی عملکرد پیش‌شرط ساز^۳های به‌دست آمده از شکافت متناظر با روش‌های GJ، GGS و GSOR می‌پردازیم. برای این منظور ابتدا برای یادآوری کاربرد شکافت در ساختن پیش‌شرط‌ساز برای سرعت بخشیدن به همگرایی روش تکراری کم‌ترین مانده تعمیم یافته^۴، تذکر ۴ ارائه می‌شود.

تذکر ۴. فرض کنید شکافت $A = M - N$ داده شده باشد. می‌توان از M^{-1} به‌عنوان پیش‌شرط‌ساز راست در روش GMRES به‌منظور سرعت بخشیدن به همگرایی این روش استفاده کرد. در واقع، به‌جای به‌کارگیری روش GMRES برای حل (۱) روش GMRES برای حل دستگاه معادلات خطی $AM^{-1}\tilde{u} = b$ ($\tilde{u} = Mu$) به‌کار برده می‌شود، در این حالت روش را GMRES پیش‌شرط‌سازی شده^۵ می‌نامیم، برای جزئیات بیشتر به [۳، ۸] مراجعه شود. در هر تکرار روش PGMRES، نیاز به حل یک دستگاه معادلات خطی به شکل $Mz = r_k$ داریم که در آن r_k نمایانگر k امین بردار مانده متناظر با تقریب به‌دست آمده در تکرار k ام است. لازم به ذکر است اگر بخواهیم نسخه پیش‌شرط‌سازی شده روش GMRES را به‌کار ببریم مجبور به حل دستگاه معادلات خطی $Mz = r_k$ به‌صورت دقیق هستیم که باعث بالا رفتن زمان اجرای الگوریتم خواهد شد. برای این منظور چنان‌که در [۲] نیز اشاره شده است، بهتر است از نسخه انعطاف‌پذیر^۶ GMRES استفاده کرد که در آن می‌توان دستگاه معادلات خطی $Mz = r_k$ را به‌صورت نادقیق حل کرد و بنابراین روش FGMRES دارای سرعت همگرایی بیش‌تری نسبت به روش PGMRES است.

در به‌کارگیری روش تکراری GGS و پیش‌شرط‌ساز به‌دست آمده از شکافت متناظر آن، به حل دستگاه‌های معادلات خطی با ماتریس ضرایب A ، Q و D نیاز داریم. برای تمامی ابعاد، ماتریس Q بدین‌صورت تعریف می‌شود:

$$Q = \frac{1}{0.82528} BA^{-1}B^T.$$

برای جزئیات بیشتر به تذکر ۲ مراجعه شود.

در به‌کارگیری روش GSOR و روش FGMRES (با پیش‌شرط سازهای به‌دست آمده از شکافت‌های متناظر با روش‌های GJ و GSOR) به حل دستگاه معادلات خطی با ماتریس ضرایب D و هم‌چنین دستگاه معادلات خطی بدین‌صورت نیاز داریم:

1. Lagrangian function
2. Hessian
3. Preconditioner
4. Generalized Minimal Residual (GMRES)
5. Preconditioned GMRES (PGMRES)
6. Flexible GMRES (FGMRES)

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix},$$

چنان‌که در [۱] اشاره شده است، دستگاه مذکور در این دو مرحله حل می‌شود:

• بردار w_2 از حل $BA^{-1}B^T w_2 = BA^{-1}r_1 - r_2$ به دست می‌آید.

• بردار w_1 به صورت $w_1 = A^{-1}(r_1 - B^T w_2)$ محاسبه می‌شود.

در تمامی نتایج عددی دستگاه‌های معادلات خطی متناظر با ماتریس‌های ضرایب A و D با استفاده از روش چولسکی و دستگاه معادلات خطی با ماتریس ضرایب $BA^{-1}B^T$ با استفاده از روش گرادیان مزدوج پیش‌شرط‌سازی شده^۱ و با به کار بردن پیش‌شرط‌ساز BAB^T حل شده است. لازم به ذکر است که ماتریس‌های $BA^{-1}B^T$ و BAB^T به صورت صریح ساخته نشده است، برای جزئیات بیشتر به [۱] مراجعه شود. محک خاتمه استفاده شده در روش PCG در داخل روش‌های GGS و GSOR (روش FGMRES با پیش‌شرط‌ساز به دست آمده از شکافت این روش‌ها) به ترتیب برابر است با 10^{-3} و 10^{-5} . هم‌چنین، در به کارگیری روش PCG داخل روش FGMRES با پیش‌شرط‌ساز به دست آمده از شکافت متناظر با روش G محک خاتمه 10^{-3} قرار داده شده است. لازم به ذکر است که برای بالا بردن سرعت همگرایی روش‌ها محک خاتمه (درونی) در روش PCG تا حد امکان بزرگ انتخاب شده و در نهایت تعداد کل تکرارهای PCG تحت Iter_{pcg} گزارش شده است. همه روش‌های استفاده شده به محض برقراری رابطه (۲۷) خاتمه داده شده‌اند:

$$\|b - \mathcal{A}(x_k; y_k; z_k)\|_2 \leq 10^{-12} \|b\|_2, \quad (27)$$

که در آن $(x_k; y_k; z_k)$ تقریب به دست آمده در گام k ام است. تعداد تکرار و زمان مورد نیاز برای همگرایی روش‌های بررسی شده برای برقراری محک خاتمه (۲۷) را به ترتیب با "Iter" و "CPU" نشان می‌دهیم. هم‌چنین، مقدار پارامتر بهینه در روش GSOR (با در نظر گرفتن تذکر ۳ برابر با ۰.۹۸۸ تخمین زده شده است.

جدول ۱. نتایج عددی برای حل مسئله نقطه زینی مضاعف (۱)

size	روش GGS			روش GSOR		
	Iter	CPU	Iter _{pcg}	Iter	CPU	Iter _{pcg}
۵۱۱۵	۲۴	۰.۰۱۹۱	۵۶	۵	۰.۰۲۲۸	۱۲۶
۱۰۲۳۵	۲۴	۰.۰۳۱۵	۵۶	۵	۰.۴۱۸.۰	۱۲۲
۲۰۴۷۵	۲۴	۰.۰۶۵۱	۵۶	۵	۱۲۰۵.۰	۱۷۱
۴۰۹۵۵	۲۴	۰.۱۱۸.۰	۵۶	۵	۱۴۵۶.۰	۱۱۴
۸۱۹۱۵	۲۴	۲۴۸۹.۰	۵۶	۵	۴۱۵۳.۰	۱۵۹
۱۶۳۸۳۵	۲۴	۰.۵۴۴۲	۵۶	۵	۶۶۷۳.۰	۱۱۳
۳۲۷۶۷۵	۲۴	۱.۴۷۸۴	۵۶	۵	۰.۸۸۹.۲	۱۳۴
۶۵۵۳۵۵	۲۴	۳.۲۵۱۲	۵۶	۵	۰.۲۳۱.۶	۱۹۱
۱۳۱۰۷۱۵	۲۴	۵۴۹۵.۶	۵۶	۵	۶۹۳۸.۸	۱۲۸

تذکر ۵. برای به دست آوردن نتایج جدول‌های ۱ و ۲، ده بار بردار سمت راست b در دستگاه معادلات خطی (۱) به صورت تصادفی انتخاب شده است.^۲ در هر بار روش‌های تکراری به کار برده شده و در نهایت مقادیر Iter_{pcg} و Iter پس از میانگین‌گیری به نزدیک‌ترین عدد صحیح گرد و به همراه میانگین به دست آمده برای مقادیر C در جدول‌ها گزارش شده است.

1. Preconditioned Conjugate Gradient (PCG)

^۲ در هر یک از ده بار، در دستگاه معادلات خطی (۱) قرار می‌دهیم $b = \text{rand}(n+m+p, 1)$

نتایج عددی به‌دست آمده برای روش‌های GGS و GSOR در جدول ۱ گزارش شده است. چنان‌که در جدول ۱ ملاحظه می‌شود، روش GSOR به تعداد تکرار بیرونی کم‌تری نسبت به روش GGS نیاز دارد، اما با توجه به این که می‌توان در روش GGS محک خاتمه PCG را بزرگ‌تر انتخاب کرد، در نهایت روش GGS در زمان کم‌تری همگرا می‌شود. لازم به ذکر است تعداد تکرارهای هر دو روش از بُعد مسئله مستقل است و بنابراین می‌توان پیش‌بینی کرد که پیش‌شرط‌ساز به‌دست آمده از این روش‌ها نیز می‌تواند کارآمد باشد. نتایج حاصل از به‌کارگیری روش FGMRES با پیش‌شرط‌سازهای متناظر با شکافت‌های متناظر با روش‌های GJ، GGS و GSOR در جدول ۲ گزارش شده که در آن منظور از نماد "Pre" پیش‌شرط‌ساز استفاده شده در روش FGMRES است.

لازم به ذکر است که روش GMRES بدون استفاده از پیش‌شرط‌ساز بسیار ضعیف عمل می‌کند، بنابراین نتایج متناظر با آن گزارش نشده است، هم‌چنین زمان مورد نیاز برای روش PGMRES بیش‌تر از نتایج گزارش شده در جدول ۱ است. چنان‌که ملاحظه می‌شود روش FGMRES دارای سرعت همگرایی قابل قبولی است و نسبت رشد زمان (مورد نیاز برای اجرای روش) به افزایش بُعد مسئله کم‌تر از سه است، که این نشان می‌دهد پیش‌شرط‌سازهای متناظر با شکافت‌های GGS، GJ و GSOR بهینه هستند. برای جزئیات بیش‌تر در مورد مفهوم کلی پیش‌شرط‌ساز بهینه می‌توان به بحث‌های ارائه شده در [۲]، [۳] و [۴] مراجعه کرد.

جدول ۲. نتایج عددی روش FGMRES برای حل دستگاه معادلات خطی (۱)

size	Pre			Pre			Pre		
	SOR ($\omega = 1$)			GGS			Jacobi		
	Iter	CPU	Iter _{pcg}	Iter	CPU	Iter _{pcg}	Iter	CPU	Iter _{pcg}
۵۱۱۵	۵	۰.۲۱۲,۰	۱۸	۱۱	۰.۱۸۳,۰	۴۱	۹	۰.۰۱۸۵	۴۰
۱۰۲۳۵	۵	۰.۲۵۲,۰	۱۶	۱۱	۰.۳۴۲,۰	۴۰	۸	۰.۳۴۲,۰	۴۲
۲۰۴۷۵	۴	۰.۴۶۴,۰	۱۲	۱۱	۰.۷۰۵,۰	۳۴	۸	۰.۶۴۳,۰	۳۵
۴۰۹۵۵	۴	۰.۹۵۴,۰	۱۲	۱۱	۱.۵۳۹,۰	۳۲	۸	۱.۲۷۵,۰	۲۹
۸۱۹۱۵	۴	۲.۰۳۹,۰	۱۰	۱۰	۲.۶۳۸,۰	۲۹	۸	۲.۶۵۰,۰	۲۷
۱۶۳۸۳۵	۴	۳.۹۹۹,۰	۱۰	۱۰	۵.۵۹۶,۰	۲۷	۷	۵.۱۸۵,۰	۲۷
۳۲۷۶۷۵	۴	۸.۷۰۱,۰	۱۰	۱۰	۲۹.۳۲,۱	۲۷	۷	۲۲.۹۹,۱	۲۸
۶۵۵۳۵۵	۴	۸۳.۴۵,۱	۱۰	۱۰	۶۹.۶۵,۲	۲۵	۶	۳۸.۵۸,۲	۲۴
۱۳۱۰۷۱۵	۴	۷۵۰.۹,۳	۱۰	۱۰	۵۹۳.۷,۵	۲۶	۶	۵۷۵.۳,۴	۲۶

نتیجه‌گیری

در این مقاله به مطالعه و بررسی برخی از روش‌های تکراری ایستا و آنالیز همگرایی آن‌ها برای حل مسئله نقطه زینی مضاعف پرداختیم. عملکرد پیش‌شرط‌سازهای استخراج شده (از شکافت متناظر با روش‌های ایستای مورد بحث) نشان می‌دهد پیش‌شرط‌سازهای متناظر با شکافت‌های ژاکوبی تعمیم یافته، گاوس-سیدل تعمیم یافته و فوق تخفیف متوالی تعمیم یافته (به‌ویژه برای مسئله متناظر با کاربرد در نظر گرفته شده) دارای خواص بهینگی هستند.

فرض کنید $r > 0$ داده شده است، به‌وضوح دستگاه معادلات خطی (۱) با دستگاه معادلات خطی زیر معادل است:

$$\begin{bmatrix} \tilde{A} & B^T & C^T \\ B & 0 & 0 \\ C & 0 & -D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{b}_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}, \quad (28)$$

که در آن $\tilde{A} = A + rB^T B$ و $\tilde{b}_1 = b_1 + r^T B$. برای دستگاه مذکور حالتی وجود دارد که شرط $\tilde{A} \succ C^T D^{-1} C$ با انتخاب r به قدر کافی بزرگ می‌تواند برقرار باشد. بنابراین اگر $A \succ C^T D^{-1} C$ برقرار نباشد، می‌توان در برخی مواقع به جای حل (۱)، روش‌های تکراری را برای حل دستگاه معادلات خطی معادل (۲۸) به کار برد. ایده حل (۲۸) به جای دستگاه معادلات خطی (۱) را می‌توان برگرفته از شگرد استفاده شده در [۵] دانست. در هر حال، در این مقاله به جزئیات مربوط به حل (۲۸) و انتخاب مناسب پارامتر r پرداخته نشده است. بررسی جزئیات این شگرد و ارائه پیش‌شرط‌سازهای مناسب برای حل (۲۸) به عنوان موضوع تحقیقاتی آینده پیشنهاد می‌شود.

تشکر و قدردانی

از الیسون رمیج^۱ برای ارسال ماتریس‌های مربوط به مسئله مدل‌سازی هدایت‌گرهای کریستال مایع سپاس‌گزاری می‌کنیم. هم‌چنین نویسندگان از نظرات و پیشنهادات داوران که باعث بهبود کیفیت علمی مقاله شده است، صمیمانه تشکر و قدردانی می‌کنند.

منابع

1. Beik F. P. A., Benzi M., "Iterative Methods for Double Saddle Point Systems", *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 39 (2018) 902-921.
2. Beik F. P.A, Benzi M., Chaparpordi S. H. A., "On block diagonal and block triangular iterative schemes and preconditioners for stabilized saddle point problems", *J. Comput. Appl. Math.* 326 (2017) 15-30.
3. Benzi M., "Preconditioning techniques for large linear systems", a survey, *J. Comput. Phys.* 182 (2002) 417-477.
4. Benzi M., Golub G. H., Liesen J., "Numerical solution of saddle point problems", *Acta Numer.* 14 (2005) 1-137.
5. Benzi M., Wang Z., "Analysis of augmented lagrangian-based preconditioners for the steady incompressible Navier-Stokes equations", *SIAM J. Sci. Comput.* 33 (2011) 2761-2784.
6. Horn R. A., Johnson C. R., "Matrix Analysis", Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1985.
7. Ramage A., Gartland Jr E. C., "A preconditioned nullspace method for liquid crystal director modeling", *SIAM J. Sci. Comput.* 35 (2013) B226-B247.
8. Saad Y., "Iterative Methods for Sparse Linear Systems", PWS Publishing Company, Boston, 1996.
9. Song Y., "Semiconvergence of extrapolated iterative methods for singular linear systems", *J. Comput. Appl. Math.* 106 (1999) 117-129.
10. Young D. M., "Iterative Solution of Large Linear Systems", Academic Press, New York, 1971.

1. Alison Ramage