

**В. П. Ильин**

## **МНОГОСЕТОЧНЫЕ МЕТОДЫ НЕПОЛНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ В ПОДПРОСТРАНСТВАХ КРЫЛОВА**

### §1. ВВЕДЕНИЕ

Многосеточные методы решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), возникающих при аппроксимации многомерных краевых задач, занимают исключительное место в вычислительной алгебре, поскольку они приводят к асимптотически оптимальным алгоритмам, для которых объемы необходимых компьютерных ресурсов пропорциональны количеству неизвестных. В пионерских работах Р. П. Федоренко [1] и Н. С. Бахвалова [2] эти подходы базировались на спектральных принципах с раздельным подавлением компонент ошибки, соответствующих низким и высоким частотам. В дальнейших многочисленных исследованиях их развитие проводилось в геометрическом плане (в частности, рассматривался так называемый каскадный метод [3–5]), в алгебраическом плане (наиболее популярное название – AMG, – от Algebraic Multi Grid) и в комбинаторном плане, основанном на преобразованиях сеточных графов (например, с формированием остовных деревьев – Spanning Trees), см. [6–20] и цитируемую там литературу. Сформировавшиеся традиционные подходы базируются на итерационных процессах с применением операторов сглаживания (smoothing), редукции, или ограничения (restriction), грубосеточной коррекции (coarse grid correction) и продолжения (prolongation). Разнообразные методические находки сопровождались также обширными программными разработками и их успешными практическими применениями, в том числе, с распараллеливанием алгоритмов. В данной работе мы исследуем многосеточные итерационные методы как специальный случай предобусловленных алгоритмов крыловского типа при иерархической, или рекурсивной упорядоченности узлов сетки и соответствующей матричной структуре.

---

*Ключевые слова:* вложенные сетки, предобусловленные матрицы, подпространства Крылова, методы неполной факторизации.

Настоящая работа построена следующим образом. В §2 мы описываем общую схему построения алгебраических многосеточных методов на основе рекурсивного упорядочения векторных компонент; §3 посвящен изложению предобусловленных итерационных методов в подпространствах Крылова, применяемых к рассматриваемым AMG. В §4 исследуются многосеточные методы неполной факторизации для решения семиточечных СЛАУ, аппроксимирующих трехмерные краевые задачи на параллелепипедальной сетке. В заключительном параграфе обсуждаются возможности обобщения предложенных алгоритмов на более широкий класс решаемых задач.

## §2. ОБЩАЯ СХЕМА ПОСТРОЕНИЯ МНОГОСЕТОЧНЫХ ПОДХОДОВ

Пусть требуется решить линейную алгебраическую систему с симметричной положительно определенной (с.п.о.) матрицей

$$Au = f, \quad A = \{a_{t,s}\} \in \mathcal{R}^{N,N}, \quad u = \{u_t\}, \quad f = \{f_t\} \in \mathcal{R}^N, \quad (1)$$

которая получена в результате аппроксимации некоторой трехмерной краевой задачи для дифференциального уравнения второго порядка эллиптического типа с помощью одного из методов конечных разностей, конечных объемов или конечных элементов, см. [21]. Для простоты расчетную область  $\Omega$  будем считать параллелепипедом, а ее дискретизацию будем проводить с помощью параллелепипедальной сетки, состоящей из последовательности  $m$  вложенных сеток такой же топологической структуры:

$$\Omega^h = \Omega_1^h \supset \Omega_2^h \supset \dots \supset \Omega_m^h.$$

Предполагается для простоты, что граница  $\Gamma$  области  $\Omega$  проходит по граням самой грубой сетки  $\Omega_m^h$ , а формирование мелкой сетки  $l$ -го уровня  $\Omega_l^h$  производится путем проведения новых координатных плоскостей, осуществляющих деление пополам всех шагов грубой сетки  $\Omega_{l+1}^h$ ,  $l = 1, 2, \dots, m-1$ . Возможные обобщения рассматриваемых подходов на другие типы областей и сеток будут описаны ниже.

Сложившийся современный подход к построению многосеточных алгоритмов основывается на формировании итерационных процессов в подпространствах Крылова со специальным конструированием предобуславливающих матриц, соответствующих используемым рекурсивным структурам данных. Мы будем исследовать СЛАУ узлового типа,

когда каждому узлу любой из сеток соответствует по одной компоненте заданного и неизвестного векторов, а их нумерацию будем связывать с рекурсивной многоуровневой упорядоченностью узлов вложенных сеток. Множество узлов и векторных компонент исходной СЛАУ на самой мелкой (исходной) сетке представим в двухуровневом виде:

$$\begin{aligned}\Omega^h &= \Omega_1^h = \widehat{\Omega}_1^h \cup \check{\Omega}_1^h, & \check{\Omega}_1^h &= \Omega_2^h, \\ u &= u^{(1)} = \left( (\widehat{u}^{(1)})^\top, (\check{u}^{(1)})^\top \right)^\top, & \check{u}^{(1)} &= u^{(2)}.\end{aligned}\quad (2)$$

Определенные здесь подмножества и подвекторы второго уровня могут быть разложены аналогичным образом, в результате чего для  $m$  сеток получаем следующие многоуровневые представления:

$$\begin{aligned}\Omega^h &= \Omega_1^h = \widehat{\Omega}_1^h \cup \widehat{\Omega}_2^h \dots \cup \widehat{\Omega}_{m-1}^h \cup \Omega_m^h, \\ u &= u^{(1)} = \left( (\widehat{u}^{(1)})^\top, (\widehat{u}^{(2)})^\top, \dots, (\widehat{u}^{(m-1)})^\top, (u^{(m)})^\top \right)^\top,\end{aligned}$$

где каждое множество  $l$ -го уровня разбивается на два подмножества, одно из которых относится к следующему уровню и также делится на две части:

$$\Omega_l^h = \widehat{\Omega}_l^h \cup \check{\Omega}_l^h, \quad \check{\Omega}_l^h = \Omega_{l+1}^h, \quad u^{(l)} = \left( (\widehat{u}^{(l)})^\top, (\check{u}^{(l)})^\top \right)^\top, \quad \check{u}^{(l)} = u^{(l+1)}.$$

Вектор правой части  $f$  записывается в аналогичной иерархической форме:  $f = f^{(1)} = (\widehat{f}^{(1)}, \check{f}^{(1)})$ ,  $\check{f}^{(1)} = f^{(2)}$ . При выбранной в (2) двухуровневой упорядоченности узлов и соответствующем определении подвекторов исходная система записывается в следующем блочном виде:

$$Au = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{u}^{(1)} \\ u^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \widehat{f}^{(1)} \\ f^{(2)} \end{bmatrix} = f. \quad (3)$$

Простейшим вариантом (а в общем случае – главной составной частью многосеточного метода) является его двухсеточный вариант, который заключается в том, что после некоторых преобразований с помощью прямого метода вычисляется подвектор  $(u^{(2)})^0$  из системы (3). Точнее, находится его некоторое начальное значение, получаемое из приближенного исключения подвектора  $\widehat{u}^{(1)}$  и уточняемое на последующих итерациях.

Первое итерационное приближение для уравнения (3) при заданном начальном векторе  $u^0$  и некотором подвекторе  $(u^{(2)})^0 \in \mathbb{R}^{N_2}$  можно схематично представить в виде  $u = u^0 + P(u^{(2)})^0$ , где  $P \in \mathbb{R}^{N, N_2}$  есть

оператор продолжения, построенный, например, с помощью операций интерполирования с грубой сетки на мелкую. После подстановки этого выражения в СЛАУ (3), предварительно умноженную слева на оператор редукции  $R = P^\top$ , получаем уравнение

$$A_c(u^{(2)})^0 = R(f - Au^0) = Rr^0, \quad A_c = RAP, \quad (4)$$

где  $A_c \in \mathbb{R}^{N_2, N_2}$  есть ассоциированная с грубой сеткой малоранговая “аппроксимация” матрицы  $A$ . Пролонгатор  $P$  считаем матрицей полного ранга. Тогда имеем:

$$u = u^0 + B_2^{-1}r^0, \quad B_2^{-1} = PA_c^{-1}R = B_2^{-T} = (B_2^{-1})^T. \quad (5)$$

Здесь симметричная матрица  $B_2 \in \mathbb{R}^{N, N}$  может рассматриваться как предобуславливающая к  $A$ , обращение которой фактически требует решения алгебраической системы (4) на грубой сетке, а векторное соотношение (5) может быть основой для построения итерационных двухсеточных методов. В данном случае, с методической точки зрения, имеется альтернатива: решение СЛАУ (4) прямым или итерационным методом. Второй вариант приводит к двухуровневому процессу, но мы в данной работе рассматриваем первый, позволяющий единообразно использовать многократно вложенные сетки, если структуру матрицы  $A_c$  формировать аналогичной структуре матрицы  $A$ .

Приведенная форма двухсеточного метода является незаконченной: в начале каждой итерации необходимо добавить операцию предварительного сглаживания (pre-smoothing), а в конце — завершающего сглаживания (post-smoothing). На матричном уровне это осуществляется корректировкой предобуславливателя: в формуле (5) вместо  $B_2^{-1}$  вводим предобуславливающую матрицу

$$\bar{B}_2^{-1} = S_2PA_c^{-1}RS_1, \quad S_1 = S_2^\top,$$

где операторы  $S_1, S_2$  обеспечивают симметричность матрицы  $\bar{B}_2$ , а их конкретный вид будет рассмотрен ниже.



Получаемую из (1) предобусловленную СЛАУ записываем в виде

$$\bar{A}\bar{u} = \bar{f}, \quad \bar{A} = L_B^{-1}AU_B^{-1}, \quad \bar{u} = U_B u, \quad \bar{f} = L_B^{-1}f. \quad (8)$$

Представим итерационные методы крыловского типа для решения симметричной системы (8) в следующей форме:

$$\begin{aligned} \bar{r}^0 &= \bar{f} - \bar{A}\bar{u}^0, \quad \bar{p}^0 = \bar{r}^0; \quad n = 0, 1, \dots: \\ \bar{u}^{n+1} &= \bar{u}^n + \alpha_n \bar{p}^n = \bar{u}^0 + \alpha_0 \bar{p}^0 + \dots + \alpha_n \bar{p}^n, \\ \bar{r}^{n+1} &= \bar{f} - \bar{A}\bar{u}^{n+1} = \bar{r}^n - \alpha_n \bar{A}\bar{p}^n = \bar{r}^0 - \alpha_0 \bar{A}\bar{p}^0 - \dots - \alpha_n \bar{A}\bar{p}^n, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\bar{u}^0$  – произвольное начальное приближение, а  $\bar{p}^n$  суть направляющие векторы, удовлетворяющие условиям ортогональности

$$(\bar{A}^\gamma \bar{p}^n, \bar{p}^k) = (\bar{p}^n, \bar{p}^k)_\gamma = \rho_n^{(\gamma)} \delta_{k,n}, \quad \rho_n^{(\gamma)} = (\bar{p}^n, \bar{p}^n)_\gamma. \quad (10)$$

Здесь  $\delta_{k,n}$  – символ Кронекера, а величины  $\gamma = 0, 1, 2$  соответствуют алгоритмам минимальных ошибок, сопряженных градиентов и сопряженных невязок. При выбранной иерархической упорядоченности сеточных узлов с соответствующими структурами СЛАУ и предобуславливающей матрицы данное семейство итерационных процессов будем называть многосеточными методами сопряженных направлений. Соотношения (9), (10) обеспечивают минимизацию функционалов  $(\bar{r}^{n+1}, \bar{r}^{n+1})_{\gamma-2}$  в подпространствах Крылова

$$\mathcal{K}_{n+1}(\bar{r}^0, \bar{A}) = \text{Span} \{ \bar{r}^0, \bar{A}\bar{r}^0, \dots, \bar{A}^n \bar{r}^0 \}, \quad (11)$$

и при этом справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \Phi_\gamma(\bar{r}^{n+1}) &= (\bar{r}^{n+1}, \bar{r}^{n+1})_{\gamma-2} = \Phi_\gamma(\bar{r}^0) - \sum_{k=0}^n (\sigma_k^{(\gamma)})^2 / \rho_k^{(\gamma)}, \\ \sigma_k^{(\gamma)} &= (\bar{r}^0, \bar{p}^k)_{\gamma-1}. \end{aligned}$$

Для значений  $\gamma = 1, 2$  выполнение этих оптимизационных свойств достигается при вычислении итерационных параметров и направляющих векторов с помощью следующих выражений:

$$\begin{aligned} \alpha_n^{(\gamma)} &= \sigma_n^{(\gamma)} / \rho_n^{(\gamma)}, \quad \bar{p}^0 = \bar{r}^0, \quad \bar{p}^{n+1} = \bar{r}^{n+1} + \beta_n^{(\gamma)} \bar{p}^n, \\ \beta_n^{(\gamma)} &= -(\bar{r}^{n+1}, \bar{p}^n)_\gamma / \rho_n^{(\gamma)} = \sigma_{n+1}^{(\gamma)} / \sigma_n^{(\gamma)}. \end{aligned} \quad (12)$$

При  $\gamma = 0$  данные формулы неприменимы, поскольку в них используется обратная матрица  $\bar{A}^{-1}$ . Вместо них для нахождения направляющих векторов можно применить процесс ортогонализации Ланцоша.

Коэффициенты  $\alpha_n^{(0)}$  могут быть найдены из разложений векторов итерационной ошибки  $v^n = \bar{u} - u^n$  и невязки  $\bar{r}^n = \bar{A}v^n$ , следующих из представления для точного решения  $\bar{u} = U_B u$ :

$$\begin{aligned}\bar{u} &= \bar{u}^0 + \alpha_0^{(0)} \bar{p}^0 + \dots + \alpha_n^{(0)} \bar{p}^n + \dots, \\ v^n &= \alpha_n^{(0)} \bar{p}^n + \alpha_{n+1}^{(0)} \bar{p}^{n+1} + \dots, \\ \bar{r}^n &= \alpha_n^{(0)} \bar{A} \bar{p}^n + \alpha_{n+1}^{(0)} \bar{A} \bar{p}^{n+1} + \dots.\end{aligned}$$

Отсюда следуют рекуррентные соотношения

$$\alpha_n^{(0)} = (v^n, \bar{p}^n) / \rho_n^{(0)} = -\alpha_{n-1}^{(0)} (v^n, \bar{A} \bar{p}^{n-1}) / \rho_n^{(0)} = -\alpha_{n-1}^{(0)} (r^n, \bar{p}^{n-1}) / \rho_n^{(0)}.$$

Надо иметь в виду, что поскольку  $\sigma_0^{(0)} = (\bar{r}^0, \bar{A}^{-1} \bar{p}^0)$ , то начальный направляющий вектор нельзя брать произвольным и следует положить

$$\bar{p}^0 = \bar{A} \bar{r}^0, \quad \sigma_0^{(0)} = (\bar{r}^0, \bar{r}^0).$$

С учетом этого процесс Ланцоша для вычисления  $\bar{p}^n$  определяем следующим образом:

$$\begin{aligned}\bar{p}^0 &= \bar{A} \bar{r}^0, \quad \bar{p}^1 = \bar{A} \bar{p}^0 - \bar{\alpha}_0 \bar{p}^0, \quad n = 1, 2, \dots : \\ \bar{p}^{n+1} &= \bar{A} \bar{p}^n - \bar{\alpha}_n \bar{p}^n - \bar{\beta}_n \bar{p}^{n-1}, \\ \bar{\alpha}_n &= (\bar{A} \bar{p}^n, \bar{p}^n) / \rho_n^{(0)}, \quad \bar{\beta}_n = (\bar{p}^n, \bar{p}^n) / \rho_{n-1}^{(0)}, \quad \rho_n^{(0)} = (\bar{p}^n, \bar{p}^n).\end{aligned}\tag{13}$$

Отметим, что если реализация формул (13) и (9) осуществляется для каждой итерации одновременно, то хранение всех направляющих векторов  $\bar{p}^n$  не требуется. Традиционным и простейшим критерием окончания итераций является выполнение условия  $\|r^n\| \leq \varepsilon \|f\|$  при заданном значении  $\varepsilon \ll 1$  (по поводу более тонких подходов и оценки получаемых ошибок см. обзор [20]).

Выделим специальный экономичный вариант двустороннего предобуславливания СЛАУ, при котором матрица представляется в виде  $A = D + L + U$ , где  $D$ ,  $L$  и  $U$  являются соответственно диагональной, нижнетреугольной и верхнетреугольной частями исходной матрицы, а предобуславливающая матрица строится по методу неполной факторизации:

$$\begin{aligned}B &= (G + L)G^{-1}(G + U) = G + L + U + LG^{-1}U, \\ G &= D - \overline{LG^{-1}U} - \theta S, \quad Se = (LD^{-1}U - \overline{LG^{-1}U})e,\end{aligned}\tag{14}$$

где черта над матрицей означает некоторую ее аппроксимацию,  $S$  – диагональная матрица,  $e$  – некоторый пробный вектор (зачастую единичный), а  $\theta \in [0, 1]$  – компенсирующий параметр, см. [22].

В дальнейшем, мы будем использовать ленточные аппроксимации (выражение вида  $\bar{C} = (C)_s$  означает ленточную часть матрицы  $C$  с шириной полосы  $s$ ). Выбирая матричные множители вида

$$L_B = (G + L)U_G^{-1}, \quad U_B = L_G^{-1}(G + U), \quad G = L_G U_G, \quad U_G = L_G^\top, \quad (15)$$

получаем следующее представление предобусловленной матрицы:

$$\begin{aligned} \bar{A} &= (I + \bar{L})^{-1} + (I + \bar{U})^{-1} + (I + \bar{L})^{-1}(\bar{D} - 2I)(I + \bar{U})^{-1}, \\ \bar{D} &= L_G^{-1} D U_G^{-1}, \quad \bar{L} = L_G^{-1} L U_G^{-1}, \quad \bar{U} = L_G^{-1} U U_G^{-1}, \\ \bar{A}v &= (I + \bar{L})^{-1}[v + (\bar{D} - 2I)w] + w, \quad w = (I + \bar{U})^{-1}v. \end{aligned} \quad (16)$$

Если матрица  $G$  является ленточной (например, диагональной или трехдиагональной), то при использовании данного подхода операции умножения вектора на исходную матрицу  $A$  и на предобусловленную матрицу  $\bar{A}$  требуют примерно одинакового объема вычислений.

В некоторых случаях факторизацию предобусловливающей матрицы делать нецелесообразно, тогда для СЛАУ используется одностороннее предобусловливание. При этом из приведенных выше соотношений для  $\gamma = 1, 2$  получаем следующие формулы в терминах матриц  $A$  и  $B$  (индексы  $\gamma$  ради краткости опущены):

- для методов сопряженных градиентов:

$$\begin{aligned} r^0 &= f - Au^0, \quad p^0 = B^{-1}r^0, \quad \alpha_n = \sigma_n/\rho_n, \quad u^{n+1} = u^n + \alpha_n p^n, \\ r^{n+1} &= r^n - \alpha_n A p^n, \quad p^{n+1} = B^{-1}r^{n+1} + \beta_n p^n, \\ \sigma_n &= (r^n, p^n) = (B^{-1}r^n, r^n), \quad \rho_n = (A p^n, p^n), \quad \beta_n = \sigma_{n+1}/\sigma_n; \end{aligned} \quad (17)$$

- для методов сопряженных невязок:

$$\begin{aligned} r^0 &= f - Au^0, \quad \hat{r}^0 = \hat{p}^0 = B^{-1}r^0, \quad \alpha_n = \sigma_n/\rho_n, \\ u^{n+1} &= u^n + \alpha_n \hat{p}^n, \quad \hat{r}^{n+1} = \hat{r}^n - \alpha_n B^{-1}A \hat{p}^n, \\ \hat{p}^{n+1} &= \hat{r}^{n+1} + \beta_n \hat{p}^n, \quad \sigma_n = (B^{-1}\hat{r}^n, A \hat{p}^n) = (A \hat{r}^n, \hat{r}^n), \\ \rho_n &= (B^{-1}A \hat{p}^n, A \hat{p}^n) \quad \beta_n = \sigma_{n+1}/\sigma_n. \end{aligned} \quad (18)$$

Отметим, что в обоих этих методах на каждой итерации требуется по одному умножению вектора на матрицы  $A$  и  $B^{-1}$ , а в формулах (18) вектор  $\hat{r}^n$  — это не “настоящая”, а предобусловленная невязка,

т. е. при точных вычислениях имеем  $\widehat{r}^n = B^{-1}r^n = B^{-1}(f - Au^n)$ . При этом на каждой итерации минимизируется величина  $(B^{-1}r^n, r^n)$ .

Аналогично можно перейти к одностороннему предобуславливанию и в методе минимальных ошибок, в котором формулы для коэффициентов принимают вид

$$\begin{aligned}\alpha_n^{(0)} &= -\alpha_{n-1}^{(0)}(B^{-1}r^n, p^{n-1})/(B^{-1}p^n, p^n), \\ \alpha_n^{(0)} &= -\alpha_0^{(0)}(B^{-1}r^0, r^0)/(B^{-1}p^0, p^0),\end{aligned}$$

а направляющие векторы находятся путем замены  $\bar{P}^n = L_B^{-1}p^n$  в формулах ортогонализации Ланцоша (13).

#### §4. МНОГОСЕТОЧНЫЕ МЕТОДЫ НЕПОЛНОЙ ФАКТОРИЗАЦИИ

Перейдем теперь от абстрактного алгебраического представления алгоритмов к их конкретизации для семиточечных СЛАУ, построенных на трехмерной параллелепипедальной сетке. Пусть в СЛАУ (1) матрица  $A$  предполагается стильтесовой, т. е. симметричной положительно определенной (с.п.о.), обладающей свойством диагонального преобладания (вообще говоря, нестрогое, но строгое хотя бы в одной строке), имеющей положительные диагональные элементы и неположительные внедиагональные. Такого же типа вспомогательные матрицы  $A^{(l)}$  будут конструироваться на каждой из сеток  $\Omega_l^h$ . Соответствующие СЛАУ будем записывать в виде

$$\begin{aligned}(A^{(l)}u^{(l)})_t &= a_{t,t}^{(l)}u_t + \sum_{q=1}^6 a_{t,t+s_{t,q}}^{(l)}u_{t+s_{t,q}} = \bar{f}_t, \\ t &= 1, \dots, N_l, \quad l = 1, 2, \dots, m, \quad (19)\end{aligned}$$

где  $N_l$  есть порядок системы,  $q = 1, 2, \dots, 6$  – это номера диагоналей (возможно искривленных) из нижнетреугольной или верхнетреугольной части матрицы  $A^{(l)}$ .

Ради краткости обозначений в СЛАУ (19) остановимся далее на равномерных сетках

$$\begin{aligned}\Omega_1^h &: x_{i+1} = x_i + h, \quad y_{j+1} = y_j + h, \quad z_{k+1} = z_k + h, \quad i, j, k = 0, 1, 2, \dots; \\ \Omega_l^h &: x_{i+2^{l'}} = x_i + 2^{l'}h^x, \quad y_{j+2^{l'}} = y_j + 2^{l'}h^y, \quad z_{k+2^{l'}} = z_k + 2^{l'}h^z, \\ & \quad i, j, k = 0, 2^{l'}, 2 \cdot 2^{l'}, 3 \cdot 2^{l'}, \dots, \quad l' = l - 1, \dots, m - 1.\end{aligned}$$

В случае переменных шагов меняются только коэффициенты арифметических выражений, общая же вычислительная схема описываемых ниже алгоритмов не меняется.

Рассмотрим пару “соседних” из семейства линейных алгебраических систем (19):

$$A^{(l)}u^{(l)} = f^{(l)}, \quad A^{(l+1)}u^{(l+1)} = f^{(l+1)}, \quad l = 1, \dots, m-1,$$

для которых  $l$ -я относится к более мелкой, а  $(l+1)$ -я – к более грубой сетке. Узлы из  $\Omega_l^h$  разобьем на четыре подмножества разных типов и пронумеруем их в указанном порядке:

$$\Omega_l^h = \Omega_l^1 \cup \Omega_l^2 \cup \Omega_l^3 \cup \Omega_l^4, \quad \Omega_l^4 = \Omega_{l+1}^h,$$

которые относятся последовательно к центрам объемов и граней, к серединам ребер и узлам вложенной грубой сетки  $\Omega_{l+1}^h$  (соответственно обозначенные на рис. 1 символами  $\otimes, \circ, \times, \bullet$ ). Обозначая через  $\bar{u}_1^{(l)}, \bar{u}_2^{(l)}, \bar{u}_3^{(l)}, \bar{u}_4^{(l)}$  и  $\bar{f}_1^{(l)}, \bar{f}_2^{(l)}, \bar{f}_3^{(l)}, \bar{f}_4^{(l)}$  ассоциированные подвекторы (с размерностями  $N_1^{(l)}, N_2^{(l)}, N_3^{(l)}, N_4^{(l)}$ ) в  $l$ -й СЛАУ, запишем ее в соответствующем блочном виде:

$$A^{(l)}u^{(l)} = \begin{bmatrix} A_{1,1}^{(l)} & A_{1,2}^{(l)} & 0 & 0 \\ A_{2,1}^{(l)} & A_{2,2}^{(l)} & A_{2,3}^{(l)} & 0 \\ 0 & A_{3,2}^{(l)} & A_{3,3}^{(l)} & A_{3,4}^{(l)} \\ 0 & 0 & A_{4,3}^{(l)} & A_{4,4}^{(l)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u}_1^{(l)} \\ \bar{u}_2^{(l)} \\ \bar{u}_3^{(l)} \\ \bar{u}_4^{(l)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{f}_1^{(l)} \\ \bar{f}_2^{(l)} \\ \bar{f}_3^{(l)} \\ \bar{f}_4^{(l)} \end{bmatrix}.$$

Здесь правый нижний блок переобозначается как  $A_{4,4}^{(l)} = A^{(l+1)}$  и переписывается в аналогичной форме блочного порядка четыре. Таким образом, исходная блочная матрица  $A = A^{(1)}$  определяется рекурсивным  $m$ -стадийным образом. Поскольку в представленной формализации СЛАУ с двухуровневым упорядочением переменных, соответствующим разным номерам вложенных сеток и типов узлов в каждой из них, запись используемых векторов имеет необычную рекурсивную структуру:

$$(u^{(l)}) = ((u_1^{(l)})^\top, (u_2^{(l)})^\top, (u_3^{(l)})^\top, (u^{(l+1)})^\top)^\top, \quad l = 1, 2, \dots, m-1,$$

причем при  $l+1 = m$  разбиение подвектора  $u^{(m)}$  не проводится.

Для матрицы  $A^{(l)} = D^{(l)} + L^{(l)} + U^{(l)}$  предобусловливатель определяется в следующем факторизованном виде (напомним, что  $(C)_1$  означает

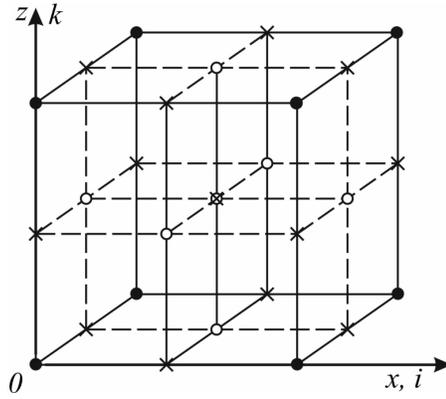


Рис. 1. Обозначения узлов двухуровневого метода на кубических вложенных сетках.

диагональную часть матрицы  $C$ ):

$$\begin{aligned}
 B^{(l)} &= (G^{(l)} + U^{(l)})(G^{(l)})^{-1}(G^{(l)} + U^{(l)}) \\
 &= \begin{bmatrix} G_{1,1}^{(l)} & 0 & 0 & 0 \\ A_{2,1}^{(l)} & G_2^{(l)} & 0 & 0 \\ 0 & A_{3,2}^{(l)} & G_3^{(l)} & 0 \\ 0 & 0 & A_{4,3}^{(l)} & G_4^{(l)} \end{bmatrix} (G^{(l)})^{-1} \begin{bmatrix} G_1^{(l)} & A_{1,2}^{(l)} & 0 & 0 \\ 0 & G_2 & A_{2,3}^{(l)} & 0 \\ 0 & 0 & G_3^{(l)} & A_{3,4}^{(l)} \\ 0 & 0 & 0 & G_4^{(l)} \end{bmatrix}, \quad (20)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 G_1^{(l)} &= A_{1,1}^{(l)}, \quad G_2^{(l)} = A_{2,2}^{(l)} - (A_{2,1}^{(l)}(G_1^{(l)})^{-1}A_{1,2}^{(l)})_1 - \theta_2 S_2^{(l)}, \\
 S_2^{(l)} e_2 &= \left[ A_{2,1}^{(l)}(G_1^{(l)})^{-1}A_{1,2}^{(l)} - (A_{2,1}^{(l)}(G_1^{(l)})^{-1}A_{1,2}^{(l)})_1 \right] e_2, \\
 G_3^{(l)} &= A_{3,3}^{(l)} - \left( A_{3,2}^{(l)}(G_2^{(l)})^{-1}A_{2,3}^{(l)} \right)_1 - \theta_3 S_3^{(l)}, \\
 S_3^{(l)} e_3 &= \left[ A_{3,2}^{(l)}(G_2^{(l)})^{-1}A_{2,3}^{(l)} - \left( A_{3,2}^{(l)}(G_2^{(l)})^{-1}A_{2,3}^{(l)} \right)_1 \right] e_3, \\
 G_4^{(l)} &= A_{4,4}^{(l)} - A_{4,3}^{(l)}(G_3^{(l)})^{-1}A_{3,4}^{(l)}.
 \end{aligned}$$

Здесь  $G_1^{(l)}, G_2^{(l)}, G_3^{(l)}$  – диагональные матрицы, а  $G_4^{(l)}$  – семидиагональная матрица с тем же матричным портретом, что и  $A^{(l+1)}$ , и именно ее

мы будем считать матрицей СЛАУ для сетки следующего уровня. Параметры компенсации  $\theta_2^{(l)}, \theta_3^{(l)} \in [0, 1]$  для общности считаются различными, а пробные векторы  $e_2^{(l)}, e_3^{(l)}$  имеют размерности  $N_2^{(l)}, N_3^{(l)}$ . Для конкретизации предобуславливающей матрицы  $B^{(l)}$  нам еще необходимо представить матрицу  $G_4^{(l)}$  в факторизованной форме, и при этом мы будем рассматривать два варианта. Если  $l + 1 = \bar{m}$  есть номер последней применяемой сетки, то используется точное треугольное разложение  $G_4^{(l)} = A^{(l+1)} = L^{(l+1)}U^{(l+1)}$ . В противном случае матрица  $A^{(l+1)} = G_4^{(l)}$  в (20) приближенно заменяется предобуславливателем  $B^{(l+1)}$ , определяемым в соответствии с этой же формулой. Применение предобуславливателя в форме (20) формально соответствует неявному методу неполной факторизации IFIM (Incomplete Factorization Implicit Method, см. [22]) с компенсацией, или согласованием строчных сумм.

Отметим, что при  $\theta_2^{(l)} = \theta_3^{(l)} = 1$  (режим полной компенсации) происходит обобщенное согласование строчных сумм исходной и предобуславливающей матриц в смысле выполнения равенства  $Ae = Be$  на векторе

$$e = e^{(l)} = ((e_1^{(l)})^\top, (e_2^{(l)})^\top, (e_3^{(l)})^\top, (e_4^{(l)})^\top)^\top,$$

где  $e^{(l)} \in \mathcal{R}^{N_l}$  определяется рекурсивным образом аналогично  $u^{(l)}$ ; векторы  $e_2^{(l)}, e_3^{(l)}$  определяются в соответствии с (20), а векторы  $e_1^{(l)}, e_4^{(l)}$  могут быть произвольными. При этом предобусловленный итерационный метод сходится за одну итерацию. Если вектор начальной ошибки равен  $u - u^0 = e^{(l)}$ . Оптимизация компенсирующих параметров  $\theta$  и оценки получаемой скорости сходимости итераций для некоторых частных случаев представлены в [22] и цитируемых там работах. В целом, вопросы выбора итерационных параметров остаются пока открытыми. Один из возможных подходов – это определение значений  $\theta_q^{(l)}$ ,  $q = 2, 3$ ,  $l = 1, \dots, m$ , в (18) из условия  $(Be, e) = (Ae, e)$ , что приводит к выражениям вида

$$\theta_q^{(l)} = \mu_q^{(l)} / (\nu_q^{(l)} - \mu_q^{(l)}), \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} \mu_q^{(l)} &= \left( A_{q,q-1}^{(l)} (G_{q-1}^{(l)})^{-1} A_{q-1,q}^{(l)} e_q^{(l)}, e_q^{(l)} \right), \\ \nu_q^{(l)} &= \left( \left( A_{q,q-1}^{(l)} (G_{q-1}^{(l)})^{-1} A_{q-1,q}^{(l)} \right)_1 e_q^{(l)}, e_q^{(l)} \right). \end{aligned}$$

Для целесообразного выбора числа  $m$  используемых вложенных сеток необходимо оценить объем вычислений на реализацию решения прямым алгоритмом  $l$ -й СЛАУ размерности  $N_l \equiv CN_1 \times 2^{-3(l-1)}$ ,  $l = 1, 2, \dots, m$ , где  $C$  – некоторая константа. Поскольку метод треугольного разложения требует выполнения  $Q_l \approx CN_l^3$  арифметических операций, то мы имеем  $Q_m/Q_1 \approx 2^{3(1-m)}$ . Это означает, например, что затраты на применение прямого алгоритма в двухсеточном методе в  $512 = 2^9$  раз, а для  $m = 3$  – в  $2^{18}$  раз меньше, чем при непосредственном решении исходных СЛАУ. А поскольку с увеличением числа сеток качество предобусловливания и скорости сходимости итераций только ухудшаются, то с практической точки зрения выбор многосеточного метода сводится к  $m = 2$  или  $m = 3$ .

Применение предобусловливающей матрицы  $B$  при вычислении последовательных итерационных приближений  $u^n$  основывается на решении вспомогательных СЛАУ

$$Bv^n = r^n \equiv f - Au^n, \quad (22)$$

где

$$B = (G + L)G^{-1}(G + U), \quad v^n = (v_1^n, v_2^n, v_3^n, v_4^n),$$

при заданном произвольном начальном векторе  $u^0$ .

С учетом структуры предобусловливателя  $B$ , при заданном векторе невязки  $r^n$  реализация формул (22) осуществляется с помощью соотношений

$$(G + L)w^n = r^n, \quad (G + U)v^n = Gw^n, \quad G = \text{diag}\{G_k\}, \quad (23)$$

которые в блочно-компонентном представлении имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} G_1 w_1^n &= r_1^n; & k = 2, 3, 4: & \quad G_k w_k^n = r_k^n - A_{k,k-1} w_{k-1}^n, \\ v_4^n &= w_4^n; & k = 3, 2, 1: & \quad v_k = w_k - G_k^{-1} A_{k,k+1} w_{k+1}^n. \end{aligned} \quad (24)$$

Важно отметить, что решение вспомогательной СЛАУ с матрицей  $G_4$  из (24) фактически означает решение системы на редкой сетке  $\Omega_2$  с такой же семидиагональной структурой, что и у матрицы  $A^{(2)}$ . При этом реализация формулы (23) при  $k = 1, 2, 3$  представляет собой этап редукции (restriction) двухсеточного метода, формулы (24) при  $k = 3, 2, 1$  – это стадия продолжения (prolongation), а решение полученной СЛАУ с матрицей  $G_4$  – это грубосеточная коррекция.

Заметим, что формулы (22)–(24), определяющие в соответствии с (14) метод неполной факторизации, при упрощенной характеристизации

$G = \omega^{-1}D$  представляют собой симметричный (если  $A$  – симметричная матрица) или несимметричный метод последовательной верхней релаксации, SSOR или USSOR соответственно. Если  $\omega = 1$ , то метод SSOR, переходящий в данном случае в симметричный метод Зейделя, при стилтесовости матрицы  $A$  порождает монотонную предобуславливающую матрицу, которая, более того, имеет монотонные множители в разложении Холецкого, т. е.

$$B_1 = L_1 U_1, \quad L_1 = (D + U)U_D^{-1} = U_1^\top, \quad D = L_D U_D, \quad (25)$$

а матрицы  $B_1^{-1}, L_1^{-1}, U_1^{-1}$  являются неотрицательными и, следовательно, имеют определенные сглаживающие свойства при их умножении на векторы (см. [8, 12]).

В силу этого возможно применение предобуславливателя (25) в качестве оператора сглаживания. Более конкретно, можно использовать “двойное” предобуславливание с матрицей

$$\bar{B} = L_1 L_2 U_2 U_1 = \bar{B}^\top, \quad (26)$$

где  $L_2 U_2$  есть предобуславливатель типа IFIM или SSOR. При этом при реализациях формул (23) обращения матриц  $L_1$  и  $U_1$  осуществляют на каждой итерации этапы предварительного и завершающего сглаживания соответственно. Нетрудно показать, что для значений  $\theta_2, \theta_3 \in (0, 1)$  и  $\omega \in (0, 2)$  рассмотренные предобуславливающие матрицы, в том числе вида (25) в случае применения сглаживания, являются положительно определенными, что обеспечивает сходимость всех предложенных итерационных многосеточных методов неполной факторизации в подпространствах Крылова.

## §5. ВОЗМОЖНЫЕ ОБОБЩЕНИЯ И РАЗВИТИЕ АЛГОРИТМОВ

Представленные многосеточные подходы остаются в силе для рассматриваемых семиточечных сеточных уравнений, если расчетная область составлена из параллелепипедов, при этом допускаются краевые условия смешанного типа, если при этом матрица решаемой СЛАУ остается стилтесовой. Естественно, сетка может быть параллелепипедальной не буквально, а в топологическом смысле. Однако если она становится нерегулярной и/или неструктурированной, то построение предложенных алгоритмов требует дополнительных исследований. То же самое относится к схемам повышенного порядка, когда, например, каждому узлу, ребру и грани может соответствовать по несколько

неизвестных переменных. В данном случае, возможные блочные обобщения многосеточных методов сильно усложняют не только вычислительный процесс, но и его исследование.

Понижение размерности краевой задачи существенно упрощает рассматриваемые подходы как в случае прямоугольной, так и в случае треугольной сетки. Переход к трехмерной расчетной области с тетраэдральной сеткой также не создает принципиальных проблем, так как рекурсивная векторная структура для вложенных сеток и в этой ситуации порождает блочно-трехдиагональные матрицы для решаемых СЛАУ, что позволяет на разных сеточных уровнях строить однотипные предобуславливатели и итерационные методы сопряженных направлений. Дальнейшее возможное обобщение AMG — отход от единообразия матричных структур для алгебраических систем, получаемых на последовательности вложенных сеток.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Р. П. Федоренко, *О скорости сходимости одного интегрального процесса.* — Ж. вычисл. мат. мат. физ. **4**, No. 3 (1964), 559–564.
2. Н. С. Бахвалов, *О сходимости одного релаксационного метода при естественных ограничениях на эллиптический оператор.* — Ж. вычисл. мат. мат. физ. **5**, No. 5 (1965), 861–893.
3. F. A. Bornemann, P. Deuffhard, *The cascadic multigrid methods for elliptic problems.* — Numer. Math. **75**(2) (1996), 135–152.
4. В. П. Ильин, *Об одном варианте многосеточного метода.* — Сиб. мат. ж. **26**, No. 2 (1985), 102–107.
5. V. V. Shaidurov, *Some estimates of the rate of convergence for the cascadic conjugate-gradient method.* — J. Comput. Math. Appl. **31**, No. 4/5 (1996), 161–171.
6. A. Brandt, *Algebraic multigrid theory: the symmetric case.* — J. Appl. Math. Comput. No. 19 (1986), 23–56.
7. Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*, 2nd edn. SIAM, 2003.
8. М. А. Ольшанский, *Анализ многосеточного метода для уравнений конвекции-диффузии с краевыми условиями Дирихле.* — Ж. вычисл. мат. мат. физ. **44**, No. 8 (2004), 1450–1479.
9. Y. Notay, *Algebraic multigrid and algebraic multilevel methods: a theoretical comparison.* — Numer. Linear Algebra Appl. **12** (2005), 419–451.
10. R. Bank, R. Falgout, T. Jones, T. Manteuffel, S. McCormick, J. Ruge, *Algebraic multigrid domain and range decomposition (AMG-DD/AMG-RD).* — SIAM J. Sci. Comput. **37** (2015), 113–136.
11. Y. V. Vassilevski, M. A. Olshanskii, *Short course on multi-grid and domain decomposition methods.* — Moscow, MAKS Press Publ. (2007).
12. P. Vanek, *Smoothed prolongation multigrid with rapid coarsening and massive smoothing.* — Appl. Math. **57**, No.1 (2012), 1–10.

13. M. Brezina, R. Falgout, S. Maclachlani, T. Manteuffel, S. McCormick, J. Rugei, *Adaptive smoothed aggregation (ASA)*. — SIAM J. Sci. Comput. **25**, No. 6 (2004), 1896–1920.
14. Y. Notay, *Analysis of two-grid methods: the nonnormal case* — Report GANMN 18-01, 2018.
15. Y. Notay, A. Napov, *A massively parallel solver for discrete Poisson-like problems* — J. Comp. Phys. **231** (2015), 237–250.
16. Y. Notay, A. A. Napov, *An efficient multigrid method for graph Laplacian systems II: Robust aggregation* — SIAM J. Sci. Comput. **39**, No. 5 (2017), 379–403.
17. J. Xu, L. Zikatanov, *Algebraic Multigrid Methods*. — Cambridge University Press, 2017.
18. Я. Л. Гурьева, В. П. Ильин, А. В. Петухов, *О многосеточных методах решения двумерных краевых задач*. — Зап. научн. семин. ПОМИ **482** (2019), 14–27.
19. D. Demidov, *AMGCL: An efficient, flexible, and extensible algebraic multigrid implementation*. — Lobachevskii J. Math. **40**, No. 5 (2019), 535–546.
20. В. П. Ильин, *Итерационные предобусловленные методы в подпространствах Крылова: тенденции XXI века*. — Ж. вычисл. мат. мат. физ. **61**, No. 11 (2021), 1786–1813.
21. В. П. Ильин, *Математическое моделирование Часть 1. Непрерывные и дискретные модели*. Новосибирск, Изд-во СО РАН, 2017.
22. В. П. Ильин, *Методы и технологии конечных элементов*. — Новосибирск, ИВМиМГ СО РАН, 2007.

Pin V. P. Multigrid methods of incomplete factorization in Krylov subspaces.

The paper studies multigrid methods for solving systems of linear algebraic equations resulting from the seven-point discretization of the three-dimensional Dirichlet problem for an elliptic differential equation of the second order in a parallelepiped domain on a regular grid. The algorithms suggested are presented as special iteration processes of incomplete factorization in Krylov subspaces with a hierarchical recursive vector structure that corresponds to a sequence of embedded grids and gives rise to a block tridiagonal recursive representation of the coefficient matrix of the original linear algebraic system. The convergence of iterations is enhanced by using the principle of compensation of the row sums and also the symmetric successive block overrelaxation. An arbitrary  $m$ -grid method is defined recursively, based on the two-grid method. For simplicity, the algorithms are considered for linear systems with Stieltjes coefficient matrices. Issues related to generalization of the algorithms to larger classes of problems and, in particular, those with unsymmetric matrices are discussed.

Институт вычислительной математики  
и математической геофизики СО РАН

Поступило 03 октября 2022 г.

E-mail: ilin@sscc.ru