УДК 519.6

Алгебро-геометрические многосеточные методы декомпозиции областей*

В.П. Ильин[1,2]

[1]Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

[2]Новосибирский государственный технический университет, просп. К. Маркса, 20, Новосибирск, 630073

E-mail: ilin@sscc.ru

Английская версия этой статьи печатается в журнале "Numerical Analysis and Applications" № 2, Vol. 18, 2025.

Ильин В.П. Алгебро-геометрические многосеточные методы декомпозиции областей // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2025. — Т. 28, № 2. — С. 171–183.

Рассматриваются итерационные процессы в подпространствах Крылова для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с разреженными матрицами высокого порядка, возникающих при сеточных аппроксимациях многомерных краевых задач. Предобуславливание СЛАУ осуществляется на основе единообразного комбинированного подхода, включающего декомпозицию областей и рекурсивное применение двухсеточного алгоритма, которые реализуются путём формирования блочно-трёхдиагональных алгебраических и сеточных структур, обращаемых с помощью неполной факторизации и диагональной компенсации. Для стилтьесовых систем исследуются вопросы устойчивости и скорости сходимости итераций. Обсуждаются вопросы распараллеливания и обобщения предложенных методов на широкие классы актуальных практических задач.

DOI: 10.15372/SJNM20250204
EDN: SITBDT

Ключевые слова: *предобусловленные крыловские методы, многомерные задачи, декомпозиция областей, многосеточные подходы, неполная факторизация, диагональная компенсация, распараллеливание алгоритмов.*

Il'in V.P. Algebraic-geometric multigrid methods of domain decomposition // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2025. — Vol. 28, № 2. — P. 171–183.

Some iterative processes in Krylov subspaces are considered for solving systems of linear algebraic equations (SLAE) with high-order sparse matrices that arise in grid approximations of multidimensional boundary value problems. The SLAE are preconditioned by a uniform combined method that includes domain decomposition and recursive application of a two-grid algorithm, which are implemented by forming block-tridiagonal algebraic and grid structures inverted by using incomplete factorization and diagonal compensation. For some Stieltjes systems, stability and convergence of iterations are studied. Parallelization and generalization of the methods to wider classes of relevant practical problems are discussed.

Keywords: *preconditioned Krylov methods, multidimensional problems, domain decomposition, multigrid approaches, incomplete factorization, diagonal compensation, parallelization of algorithms.*

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (проект № FSUN-2024-0003).

Посвящается Юрию Алексеевичу Кузнецову

1. Введение

В данной работе исследуются высокопроизводительные методы решения СЛАУ высоких порядков с разреженными матрицами, возникающих при сеточных аппроксимациях многомерных краевых задач. Эта тематика сохраняет свою актуальность уже много десятилетий, поскольку рассматриваемая стадия математического моделирования является наиболее ресурсоёмкой и вносит существенный вклад как в эффективность, так и в стоимость крупномасштабных машинных экспериментов даже на самых современных суперкомпьютерах. Главные вычислительные инструменты решений больших плохо обусловленных алгебраических систем (с размерностью 10^9 и выше, имеющих числа обусловленности $\kappa > 10^{13}$) — это предобусловленные методы в подпространствах Крылова. Мы останавливаемся на симметричных СЛАУ, для которых применяются экономичные алгоритмы сопряжённых направлений с короткими рекурсиями (сопряжённых градиентов, сопряжённых невязок, минимальных ошибок), имеющие различные вариационные, проекционные и ортогональные свойства.

При этом скорость сходимости итераций в значительной степени определяется выбором предобуславливающей матрицы, которая должна быть легко обратимой и достаточно "близкой" по спектральным свойствам к матрице исходной СЛАУ. Здесь существует три главных подхода, первый из которых включает экономичные матричные разложения, среди которых существуют явные и неявные методы переменных направлений, алгоритмы симметричной последовательной верхней релаксации и неполной факторизации с диагональной компенсацией, или согласованием строчных сумм.

Другие два подхода — одни из основных вычислительных современных методов предобуславливания алгебраических систем — это декомпозиции областей (DDM) и алгебраические многосеточные подходы (AMG), которые являются, по-видимому, самыми распространёнными технологическими инструментами для решения СЛАУ с разреженными матрицами высокого порядка, возникающих при аппроксимациях на неструктурированных сетках для многомерных начально-краевых задач со сложной геометрией расчётных областей и контрастными материальными свойствами. В определённом смысле DDM и AMG являются альтернативными технологиями, поскольку первые являются главными орудиями распараллеливания, а вторые — асимптотически оптимальными по порядку алгоритмами, см. монографии и обзоры [1–4]. В данной работе предлагаются итерационные процессы в подпространствах Крылова с единообразным представлением предобуславливающей матрицы, включающим реализацию DDM и AMG на основе формирования комбинированных блочно-трёхдиагональных рекурсивных алгебраических структур и "сквозного" применения неполной факторизации с диагональной компенсацией, рассмотренных по отдельности в [5, 6]. Отметим, что изначально общая идея совместного использования этих двух подходов обсуждалась в работах [7, 8].

Построение итерационных алгоритмов с разбиением расчётной области на достаточно большое количество подобластей имеет две противоречивые особенности. Первая заключается в возможности параллельного решения вспомогательных СЛАУ в подобластях с почти линейным ускорением вычислений. Второе свойство состоит в увеличении количества итераций с ростом числа подобластей при традиционном применении аддитивного алгоритма типа Шварца–Якоби. Происходит это из-за того, что на текущей итерации каждая подобласть обменивается информацией только со своими непосредственными соседями.

Технологии многосеточных методов в последние десятилетия достаточно стабильно ориентированы на применение принципа предобуславливания СЛАУ. Однако здесь ещё имеется разнообразие полуэмпирических приёмов, таких как предварительное сглаживание и пост-сглаживание, редукция и пролонгации, V- и W-циклы, грубосеточная коррекция и т. д. Такие алгоритмы имеют уже свои достаточно распространённые программные реализации, в том числе в форме “чёрных ящиков”.

Предлагаемый нами алгебро-геометрический многосеточный метод декомпозиции областей включает два простых принципа. Первый из них содержит построение рекурсивной блочно-трёхдиагональной матричной структуры на основе определения геометрических сеточных объектов. Например, в методах декомпозиции трёхмерных сеточных расчётных областей с помощью макросеток [5] множество $\Omega^{(0)}$ узлов исходной сетки (с верхнего, или нулевого уровня) классифицируется на четыре подмножества: $\Omega_1^{(0)}$ — макроузлы, $\Omega_2^{(0)}$ — макрорёбра, $\Omega_3^{(0)}$ — макрограни и $\Omega_4^{(0)}$ — внутренние узлы подобластей, которые разбиваются на подмножества первого уровня, $\Omega_4^{(0)} = \left\{\Omega_m^{(1)},\ m = 1, 2, \ldots, M\right\}$. При соответствующей нумерации векторных компонент матрица исходной СЛАУ принимает блочно-трёхдиагональный вид.

Важно отметить, что правый нижний блок такой структуры представляет собой блочно-диагональную матрицу и для приближённого обращения каждого диагонального блока $A_m^{(1)}$, $m = 1, 2, \ldots, M$, можно применить какой-либо алгоритм неполной факторизации, среди которых самый эффективный — многосеточный [6]. Он основан на построении вложенных сеток и на введении аналогичных четырёх подмножеств сеточных узлов, но только на “микроуровне”.

Пусть в m-й подобласти густая сетка $\Omega_m^{(1)}$ построена делением пополам шагов более редкой сетки $\Omega_m^{(2)}$. В этом случае матрицы вспомогательных СЛАУ в подобластях $\Omega_m^{(1)}$ также приводятся к блочно-трёхдиагональной форме и приближённо факторизуются. При этом каждый нижний правый блок такой структуры соответствует алгебраической подсистеме на редкой сетке $\Omega_m^{(2)}$ в подобластях. Далее рассмотренная двухсеточная процедура реализуется рекурсивным образом, т. е. для каждого сеточного подмножества $\Omega_m^{(l)}$, $l = 1, 2, \ldots, L$, где L — количество вложенных сеток, а l — уровень вложенности каждой из них, формируется блочно-трёхдиагональная матрица $A_m^{(L)}$, которая затем приближённо факторизуется, а итоговая предобуславливающая матрица имеет многоуровневую структуру с вложенными факторизациями. На нижнем L-м уровне производится точное LU-разложение матрицы $A_m^{(L)}$ в каждой из M подобластей.

Настоящая работа построена следующим образом. В пункте 2 даются сведения о предобусловленных методах сопряжённых направлений для решения блочно-трёхдиагональных СЛАУ. Пункты 3 и 4 посвящены построению предлагаемых предобуславливателей на основе декомпозиции областей и многосеточных алгоритмов. В п. 5 приводятся результаты предварительных исследований по распараллеливанию рассматриваемых итерационных алгоритмов на многопроцессорных вычислительных системах с распределённой и общей памятью.

2. Алгоритмы сопряжённых направлений для блочно-трёхдиагональных СЛАУ

Мы рассматриваем для простоты симметричные положительно определённые (с.п.о.) СЛАУ в следующих обозначениях:

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

Путём преобразования с помощью с.п.о. предобуславливающей факторизованной матрицы $A \approx B = L_B U_B$, $U_B = L_B^\top$, систему (1) приведём к двусторонне предобусловленному виду

$$\bar{A}\bar{u} = \bar{f}, \qquad \bar{A} = L_B^{-1} A U_B^{-1}, \quad \bar{u} = U_B u, \quad \bar{f} = L_B^{-1} f. \tag{2}$$

Представим итерационные методы сопряжённых направлений для решения (2):

$$\begin{aligned} &\bar{r}^0 = \bar{f} - \bar{A}\bar{u}^0, \quad \bar{p}^0 = \bar{r}^0, \quad n = 0, 1, \dots, \\ &\bar{u}^{n+1} = \bar{u}^n + \alpha_n^{(\gamma)} \bar{p}^n, \quad \bar{r}^{n+1} = \bar{r}^n - \alpha_n^{(\gamma)} \bar{A}\bar{p}^n, \end{aligned} \tag{3}$$

где $\bar{u}^0$ — произвольное начальное приближение, α_n^γ — итерационные параметры, а $\bar{p}^n$ суть направляющие векторы, удовлетворяющие условиям ортогональности $\left(\bar{A}^\gamma \bar{p}^n, \bar{p}^k\right) = (\bar{p}^n, \bar{p}^k)_\gamma = \rho_n^{(\gamma)} \delta_{k,n}$, $\rho_n^{(\gamma)} = (\bar{p}^n, \bar{p}^n)_\gamma$. Здесь $\delta_{k,n}$ — символ Кронекера, а величины $\gamma = 0, 1, 2$ соответствуют алгоритмам минимальных ошибок, сопряжённых градиентов и сопряжённых невязок соответственно.

Соотношения ортогональности обеспечивают минимизацию функционалов $\Phi_\gamma\left(\bar{r}^{n+1}\right) = \left(\bar{r}^{n+1}, \bar{r}^{n+1}\right)_{\gamma-2}$ в подпространствах Крылова $\mathcal{K}_{n+1}\left(\bar{r}^0, \bar{A}\right) = \mathrm{Span}\big\{\bar{r}^0, \bar{A}\bar{r}^0, \dots, \bar{A}^n \bar{r}^0\big\}$ и при этом справедливы следующие выражения (см. подробнее [4]):

$$\begin{aligned} &\Phi_\gamma\left(\bar{r}^{n+1}\right) = \Phi_\gamma\left(\bar{r}^0\right) - \sum_{k=0}^{n} \left(\sigma_k^{(\gamma)}\right)^2 / \rho_k, \quad \sigma_k^{(\gamma)} = \left(\bar{r}^0, \bar{p}^k\right)_{\gamma-1}, \\ &\alpha_n^{(\gamma)} = \sigma_n^{(\gamma)} / \rho_n^{(\gamma)}, \quad \bar{p}^{n+1} = \bar{r}^{n+1} + \beta_n^{(\gamma)} \bar{p}^n, \quad \beta_n^{(\gamma)} = \sigma_{n+1}^{(\gamma)} / \sigma_n^{(\gamma)}. \end{aligned}$$

От рассмотренных алгоритмов с двусторонним предобуславливанием можно перейти к левому или правому предобуславливанию. В первом случае достаточно в (2) положить $L_B = B$, $U_B = I$, а во втором — $L_B = I$, $U_B = B$. В частности, экономичный метод сопряжённых градиентов с односторонним предобуславливанием для решения СЛАУ (1) описывается формулами

$$\begin{aligned} &r^0 = f - Au^0, \quad p^0 = B^{-1} r^n, \quad n = 0, 1, \dots, \\ &u^{n+1} = u^n + \alpha_n p^n, \quad r^{n+1} = r^n - \alpha_n A p^n, \\ &p^{n+1} = B^{-1} r^{n+1} + \beta_n p^n, \quad \alpha_n = \sigma_n / \rho_n, \\ &\beta_n = \sigma_{n+1} / \sigma_n, \quad \sigma_n = (r^n, B^{-1} r^n), \quad \rho_n = (p^n, A p^n). \end{aligned} \tag{4}$$

В предобусловленных методах сопряжённых направлений для выполнения условия $\|r^n\| = (r^n, r^n)^{1/2} \le \varepsilon \|f\|$ при заданном значении $\varepsilon \ll 1$ необходимое число итераций оценивается величиной

$$n(\varepsilon) \le \sqrt{\kappa}\,[(\log(2\varepsilon^{-1})]/2, \tag{5}$$

где κ — спектральное число обусловленности матрицы $B^{-1}A$.

Для последующего описания алгоритмов введём формально семейство блочно-диагональных матриц четвёртого порядка

$$A^{(l)} = \begin{bmatrix} A^{(l)}_{1,1} & A^{(l)}_{1,2} & 0 & 0 \\ A^{(l)}_{2,1} & A^{(l)}_{2,2} & A^{(l)}_{2,3} & 0 \\ 0 & A^{(l)}_{3,2} & A^{(l)}_{3,3} & A^{(l)}_{3,4} \\ 0 & 0 & A^{(l)}_{4,3} & A^{(l)}_{4,4} \end{bmatrix}, \quad l = 0, 1, \ldots, L, \quad A^{(0)} = P_0 A P_0^\top. \tag{6}$$

Здесь P_0, $P_0^\top$ — некоторые матрицы перестановок, обеспечивающие указанную структуру, а индекс l используется ради единообразного представления в дальнейшем методов DDM и AMG, причём для декомпозиции имеем $l = 0$, а $l = 1, \ldots, L$ обозначают номера сеток в каждой из подобластей.

Для аппроксимации матриц вида (6) будем рассматривать предобуславливатели в следующем приближённом блочно-факторизованном виде:

$$A^{(l)} \approx B^{(l)} = \begin{bmatrix} G^{(l)}_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ A^{(l)}_{2,1} & G^{(l)}_{2} & 0 & 0 \\ 0 & A^{(l)}_{3,2} & G^{(l)}_{3} & 0 \\ 0 & 0 & A^{(l)}_{4,3} & G^{(l)}_{4} \end{bmatrix} \big(G^{(l)}\big)^{-1} \begin{bmatrix} G^{(l)}_{1} & A^{(l)}_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & G^{(l)}_{2} & A^{(l)}_{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & G^{(l)}_{3} & A^{(l)}_{3,4} \\ 0 & 0 & 0 & G^{(l)}_{4} \end{bmatrix},$$

$$G^{(l)}_1 = A^{(l)}_{1,1}, \quad G^{(l)}_2 = A^{(l)}_{2,2} - \big(A^{(l)}_{2,1}\big(G^{(l)}_1\big)^{-1} A^{(l)}_{1,2}\big)_1 - \theta S^{(l)}_2,$$

где матрицы $G^{(l)}_k$ определяются формулами

$$\begin{aligned} & S^{(l)}_2 e_2 = \Big[A^{(l)}_{2,1}\big(G^{(l)}_1\big)^{-1} A^{(l)}_{1,2} - \big(A^{(l)}_{2,1}\big(G^{(l)}_1\big)^{-1} A^{(l)}_{1,2}\big)_1\Big] e_2, \\ & G^{(l)}_3 = A^{(l)}_{3,3} - \big(A^{(l)}_{3,2}\big(G^{(l)}_2\big)^{-1} A^{(l)}_{2,3}\big)_1 - \theta S^{(l)}_3, \\ & S^{(l)}_3 e_3 = \Big[A^{(l)}_{3,2}\big(G^{(l)}_2\big)^{-1} A^{(l)}_{2,3} - \big(A^{(l)}_{3,2}\big(G^{(l)}_2\big)^{-1} A^{(l)}_{3,2}\big)_1\Big] e_3, \\ & G^{(l)}_4 = A^{(l)}_{4,4} - \big(A^{(l)}_{4,3}\big(G^{(l)}_3\big)^{-1} A^{(l)}_{3,4}\big)_1 - \theta S^{(l)}_4, \\ & S^{(l)}_4 e_3 = \Big[A^{(l)}_{4,3}\Big(\big(G^{(l)}_3\big)^{-1} A^{(l)}_{3,4} - \big(A^{(l)}_{4,3}\big(G^{(l)}_3\big)^{-1}\big) A^{(l)}_{4,3}\Big)_1\Big] e_4. \end{aligned} \tag{7}$$

Здесь $A^{(l)}_{k,k}$, $k = 1, 2, 3, 4,$ — квадратные матрицы порядков $N^{(l)}_k$, а $S^{(l)}_k$ — диагональные. Запись вида $(C)_1$ обозначает диагональную часть матрицы C, $\theta \in [0, 1]$ — параметр компенсации, а пробные векторы (обычно их компоненты берут равными единице) e_k имеют размерности $N^{(l)}_k$. Применение предобуславливателя в форме (7) формально соответствует методу неполной факторизации (IFM), см. [9], с согласованием строчных сумм, т. е. по условию $B^{(l)} e = A^{(l)} e$ при $\theta = 1$, $e \in \mathcal{R}^N$. При использовании факторизованного предобуславливателя $B^{(l)}$ в методе сопряжённых градиентов (4) решение вспомогательных СЛАУ вида $Bq^{(l)} = r^{(l)}$ реализуется по следующим экономичным формулам:

$$\begin{aligned} & G^{(l)}_1 v^{(l)}_1 = r^{(l)}_1, \qquad G^{(l)}_2 v^{(l)}_2 = r^{(l)}_2 - A^{(l)}_{2,1} v^{(l)}_1, \qquad G^{(l)}_3 v^{(l)}_3 = r^{(l)}_3 - A^{(l)}_{3,2} v^{(l)}_2, \\ & G^{(l)}_4 v^{(l)}_4 = r^{(l)}_4 - A^{(l)}_{4,3} v^{(l)}_3, \qquad q^{(l)}_4 = v^{(l)}_4, \qquad G^{(l)}_3 w^{(l)}_3 = A^{(l)}_{3,4} q^{(l)}_4, q^{(l)}_3 = v^{(l)}_3 - w^{(l)}_3, \\ & G^{(l)}_2 w^{(l)}_2 = A^{(l)}_{2,3} q^{(l)}_3, \qquad q^{(l)}_2 = v^{(l)}_2 - w^{(l)}_2, \qquad q^{(l)}_1 = v^{(l)}_1 - \big(G^{(l)}_1\big)^{(-1)} A^{(l)}_{1,2} q^{(l)}_2. \end{aligned} \tag{8}$$

В дальнейшем при описании различных стадий вычислительного процесса для методов DDM и AMG будут использоваться соответствующие конкретизации предобуславливателей $B^{(l)}$.

В качестве модельной СЛАУ на кубической сетке с шагом h

$$\Omega^h : x_i = ih,\ i = 1, \dots, N_x,\quad y_j = jh,\ j = 1, \dots, N_y,\quad z_k = kh,\ k = 1, \dots, N_z,$$

мы рассматриваем семиточечную систему

$$\begin{aligned}(Au)_{i,j,k} = {} & a^{(0)}_{i,j,k} u_{i,j,k} - a^{(1)}_{i,j,k} u_{i-1,j,k} - a^{(2)}_{i,j,k} u_{i,j-1,k} - a^{(3)}_{i,j,k} u_{i+1,j,k} - a^{(4)}_{i,j,k} u_{i,j+1,k} - \\ & a^{(5)}_{i,j,k} u_{i,j,k-1} - a^{(6)}_{i,j,k} u_{i,j,k+1} = f_{i,j,k}\end{aligned} \tag{9}$$

со стилтьесовой матрицей, см. подробнее [10]. Важно отметить, что исследуемые в работе алгебраические системы предполагаются узлового типа, т. е. каждому узлу сетки соответствует одно уравнение и одна компонента неизвестного вектора.

3. Методы декомпозиции областей с использованием макросетей

Классические алгоритмы декомпозиции базируются на сведении решения краевой задачи в “большой” расчётной области к решению набора вспомогательных краевых задач, на контактирующих границах которых ставятся граничные условия типа Нейман–Нейман, Дирихле–Дирихле, см. [11–14] и цитируемые там работы.

Для построения алгебраического метода декомпозиции сеточных областей (ADDM) при решении СЛАУ (9) на сетке Ω^h мы определим макросетку

$$\begin{gathered}\Omega^h = \Omega^H :\ x_{i_1}, \dots, x_{i_{M_x}};\ y_{j_1}, \dots, y_{j_{M_y}};\ z_{k_1} \dots, z_{k_{M_z}}, \\ 1 < i_1 < i_{M_x} < N_x;\ \ 1 < j_1 < j_{M_y} < N_y;\ \ 1 < k_1 < k_{M_z} < N_z, \\ \Omega^H = \Omega^H_V \bigcup \Omega^H_E \bigcup \Omega^H_F,\end{gathered} \tag{10}$$

включающую множества Ω^H_V, Ω^H_E, Ω^H_F макроузлов, макрорёбер и макрограней соответственно, разделяющие остальные узлы на M_D непересекающихся подобластей: $\Omega^h_D = \cup_m \Omega^h_m$, $m = 1, \dots, M_D$.

В соответствии с данными множествами проведём упорядочение соответствующих узлов сетки: сначала нумеруем все макроузлы, потом макрорёберные и макрограневые узлы, а в конце внутренние узлы подобластей. В результате векторы из (1) разбиваются на подвекторы $u = \left(u_1^\top, u_2^\top, u_3^\top, u_4^\top\right)^\top$ и $f = \left(f_1^\top, f_2^\top, f_3^\top, f_4^\top\right)^\top$, которые, в свою очередь, могут быть разбиты на подвекторы, соответствующие отдельным макрорёбрам, макрограням и подобластям. При такой блочной структуре векторов исходная система (1) может быть записана как $A^{(0)}u = f$, где в обозначениях (6) диагональные блоки $A^{(0)}_{1,1}$, $A^{(0)}_{2,2}$, $A^{(0)}_{3,3}$, $A^{(0)}_{4,4}$ ассоциируются с макроузлами, макрорёбрами, макрогранями и подобластями соответственно.

Выпишем более подробно такую алгебраическую структуру для кубической сеточной расчётной области с числом узлов $N = N_c^3$, $N_c = N_x = N_y = N_z$, и количеством макрокоординат $M_c = M_x = M_y = M_z$, причём все макрорёбра содержат по $N_e = (N_c - M_c)/(M_c + 1)$ узлов. В этом случае размерности введённых множеств и диагональных блоков матрицы $A^{(0)}$ равны: $N_1 = M_c^3$, $N_2 = 3N_e M_e$, $N_3 = 3N_e^2 M_F$, $N_4 = N_c^3 M_D$, где $M_E = 3M_c(M_c - 1)$, $M_F = 3(M_c + 1)^2$, $M_D = (M_c + 1)^3$ — количества макрорёбер, макрограней и подобластей соответственно, совпадающие с блочными порядками матриц $A^{(0)}_{2,2}$, $A^{(0)}_{3,3}$, $A^{(0)}_{4,4}$, которые являются, в свою очередь, блочно-диагональными и имеют по три, пять и семь диагоналей каждая. Построение предобуславливателя для данной структуры и реализация соответствующей СЛАУ осуществляются по формулам (7), (8) при $l = 0$.

Здесь надо иметь в виду, что матрицы $G_k^{(0)}$ имеют в соответствии с (7) те же портреты, что и $A_{k,k}^{(0)}$ для соответствующих значений k. Вычисление значений их элементов естественно делать один раз до начала итераций. Решение СЛАУ с матрицей $G_2^{(0)}$ реализуется с помощью формул прогонок [12], причём для каждого макроребра это осуществляется независимо и легко распараллеливается. Вспомогательные пятидиагональные подсистемы для макрограней также естественным образом распараллеливаются и могут решаться с помощью метода LU-разложения, поскольку их порядки относительно невелики. Отметим, что вычисление элементов $G_3^{(0)}$ (соответствующих граничным узлам, примыкающим к макрорёбрам) требует вычисления диагональных элементов матриц, обратных к трёхдиагональным, что также легко делается с помощью методов прогонки.

Решение СЛАУ с блочно-диагональными матрицами $G_4^{(0)}$ для подобластей является наиболее трудоёмкой процедурой, но здесь в каждой из них семиточечные подсистемы являются независимыми и могут решаться параллельно. Отметим только, что в данном случае определение матричных элементов, соответствующих околограничным узлам, требует нахождения диагональных элементов матриц, обратных к пятидиагональным.

Замечание 1. Погрешность аппроксимации неполной факторизации можно уменьшить, если в (2) при определении $G_3^{(0)}$ использовать не диагональное, а трёхдиагональное ленточное приближение

$$\begin{aligned} G_3^{(0)} &= A_{3,3}^{(0)} - \Big(A_{3,2}^{(0)}\big((G_2^{(0)})^{-1}A_{2,3}^{(0)}\big)_3 - \theta S_3^{(0)}\Big), \\ S_3^{(0)} e_3 &= \Big[A_{3,2}^{(0)}(G_3^{(0)})^{-1}A_{2,3}^{(0)} - \big(A_{3,2}^{(0)}(G_2^{(0)})^{-1}A_{2,3}^{(0)}\big)_3\Big]\, e_3, \end{aligned} \tag{11}$$

которое несложно реализуется также с помощью прогонок. При этом портрет матрицы $G_3^{(0)}$, как и в (7), совпадает с портретом $A_{3,3}^{(0)}$. Аналогичным образом уточнение неполной факторизации для предобуславливателя можно осуществлять и при вычислении матрицы $G_4^{(0)}$, т.е. вместо диагональной аппроксимации использовать пятидиагональную:

$$\begin{aligned} G_4^{(0)} &= A_{4,4}^{(0)} - \Big(A_{4,3}^{(0)}\big((G_3^{(0)})^{-1}A_{3,4}^{(0)}\big)_5 - \theta S_4^{(0)}\Big), \\ S_4^{(0)} e_4 &= \Big[A_{4,3}^{(0)}(G_3^{(0)})^{-1}A_{3,4}^{(0)} - \big(A_{4,3}^{(0)}(G_3^{(0)})^{-1}A_{3,4}^{(0)}\big)_5\Big]\, e_4. \end{aligned} \tag{12}$$

В данном случае аппроксимацию $\big(G_3^{(0)}\big)^{-1}$ можно делать с помощью алгоритмов Sparse Approximate Inverse (SPAI), см. обзоры в [16, 17].

4. Многосеточные предобусловленные СЛАУ в подобластях

Решение СЛАУ с матрицей $G_4^{(0)}$ может реализовываться различными прямыми алгоритмами. Соответствующий предобуславливатель получаемого “чистого” DDM-метода, т. е. без применения AMG, будем обозначать $B = B^{(0)}\big(G_4^{(0)}\big)$. Мы в данной работе вместо обращения матрицы $G_4^{(0)}$ используем её аппроксимацию с помощью многосеточного предобуславливателя, который определяется путём рекурсивного применения двухсеточного подхода одинаково для всех подобластей. Поскольку матрица $G_4^{(0)}$ является блочно-диагональной с семидиагональными блоками на главной диагонали, её можно описать в виде

$$G_4^{(0)} = A^{(1)} = \text{block-diag}\big\{A_m^{(1)},\ m = 1, \ldots, M_D\big\}, \tag{13}$$

где каждый из блоков $A_m^{(1)}$ будем представлять в блочно-трёхдиагональной форме (6), построив подходящую алгебраическую структуру, в соответствии с многосеточным методом неполной факторизации [6]. В соответствии с терминологией работы [18] мы рассматриваем чисто алгебраический многосеточный подход без применения операций сглаживания и пост-сглаживания, V-циклов и W-циклов, характерных для сложившихся технологий, описанных в обширной литературе по данной тематике, см. [18–21] и цитируемые там работы.

При этом в каждой из подобластей Ω_m^h строим последовательность вложенных сеток Ω_m^l, $l = 1, 2, \ldots$, таких, что каждая более густая сетка Ω_m^l получается из более редкой сетки $\Omega_m^{(l+1)}$ делением шагов последней пополам. Проведём разбиение узлов для двухсеточного алгоритма на четыре подмножества, определяя при этом многосеточный метод как рекурсивное применение двухсеточного:

$$\Omega_m^1 = \Omega_1^{1,m} \bigcup \Omega_2^{1,m} \bigcup \Omega_3^{1,m} \bigcup \Omega_4^{1,m},$$

где $\Omega_4^{1,m} = \Omega_m^2$ — множество узлов редкой сетки с шагом $2h$, а элементы множеств $\Omega_k^{1,m}$ относятся к различным топологическим примитивам: ячейкам, объёмам, граням, рёбрам и узлам — редкой сетки Ω_m^2 для $k = 1, 2, 3, 4$.

Каждый узел редкой сетки имеет связи только с узлами из множества $\Omega_3^{1,m}$ (их не более шести), лежащих на рёбрах редкой сетки. Через множество $\Omega_2^{1,m}$ обозначается совокупность узлов, лежащих в серединах "редких" граней, а через $\Omega_1^{1,m}$ — множество центров "больших" ячеек (каждый из них связан с шестью "граневыми" узлами, если сетка регулярная). Отметим также, что в этом случае каждый "граневый" узел связан с двумя "объёмными", т. е. центрами больших ячеек (редкой сетки), и с четырьмя "редкими", а каждый "рёберный" узел связан с четырьмя "граневыми" и с двумя "редкими" узлами. Проводя упорядоченность узлов на Ω_m^1 в соответствии с нумерацией введённых подмножеств, мы для ассоциированных подвекторов получаем в каждой из подобластей блочно-трёхдиагональную СЛАУ с матрицей вида (6) при $l = 1$ (индекс m для краткости опускается) $A^{(1)}u^{(1)} = f^{(1)}$. Здесь каждый из векторов представляется четырьмя подвекторами $u_k^{(1)}$, $f_k^{(1)}$, $k = 1, 2, 3, 4$, а получаемые при этом первые три диагональных блока $A_{k,k}^{(1)}$ матрицы $A^{(1)}$ соответствуют "объёмным", "граневым" и "рёберным" подмножествам, блок $A_{4,4}^{(1)}$ соотносится с "редкими" узлами.

Данная матрица аппроксимируется предобуславливателем вида (7) при $l = 1$, где формулу для $G_4^{(l)}$ надо заменить на

$$G_4^{(1)} = A_{4,4}^{(1)} - A_{4,3}^{(1)}\big(G_3^{(1)}\big)^{-1} A_{3,4}^{(1)}. \tag{14}$$

При этом матрицы $G_1^{(1)}$, $G_2^{(1)}$, $G_3^{(1)}$ оказываются диагональными, а $G_4^{(1)}$ — семидиагональной и фактически соответствует системе $A^{(2)}u^{(2)} = f^{(2)}$ на редкой сетке Ω_m^2. Если такая СЛАУ решается прямым алгоритмом, то соответствующий двухсеточный предобуславливатель представим как $B = B^{(0)}\big(B^{(1)}\big(G_4^{(1)}\big)\big)$.

В противном случае строится более редкая сетка $\Omega^{2,m}$ во всех подобластях и для неё формируется блочно-трёхдиагональная структура матрицы $A^{(2)}$ вида (6) при $l = 2$, которая аппроксимируется факторизованным предобуславливателем по формулам (7) при $l = 2$, в которых матрицу $G_4^{(2)} = A^{(3)}$ определяем аналогично (14). Полученный трёхсеточный подход естественным образом обобщается на случай применения в каждой подобласти произвольного числа m сеток. Соответствующий предобуславливатель обозначаем рекурсивно как

$$B = B^{(0)}\big(B^{(1)} \dots B^{(m-1)}\big(G_4^{(m-1)}\big)\big), \qquad (15)$$

где предполагается, что последняя матрица $G_4^{(L)}$ относится к СЛАУ на самой редкой сетке и решается прямым методом.

Замечание 2. Строго говоря, при итерационном решении СЛАУ с матрицей $A^{(2)}$ мы получаем двухуровневый нелинейный вычислительный процесс и на верхнем уровне вместо предобусловленного метода сопряжённых градиентов (5) надо применять “более дорогой” метод Flexible Conjugate Gradient (FCG) [22] с хранением всех направляющих векторов $p^0, \dots, p^n$. Однако можно, естественно, предположить, что при достаточно высокой точности итерационного решения СЛАУ в подобластях вносимое в результате недоитерирования возмущение будет слабо сказываться на сходимости внешнего итерационного процесса.

Относительно определённого формулами (4), (7), (11)–(14) метода сопряжённых градиентов с алгебраической многосеточной декомпозицией областей (CG-ADD-MG) можно сформулировать следующие результаты.

Теорема 1. *Если в СЛАУ* (1) *матрица A является стилтьесовой, то такой же является предобуславливающая матрица B в* (4), *причём для $v \in \mathcal{R}^n$ выполняются неравенства*

$$\delta(Bv, v) \le (Av, v) \le \triangle(Bv, v), \quad 0 < \delta < \triangle < \infty,$$

где $\delta, \triangle$ — константы эквивалентности, вычисляемые через элементы матрицы A.

Доказательство следует непосредственно из оценок спектра стилтьесовых матриц.

Теорема 2. *В условиях теоремы 1 метод CG-ADD-MG сходится, а для числа требуемых итераций $n(\varepsilon)$ справедлива оценка* (5), *где $\kappa = \triangle/\delta$ — спектральное число обусловленности предобусловленной матрицы $B^{-1}A$.*

Данное утверждение является следствием теории предобусловленных методов сопряжённых направлений.

5. Вопросы эффективности и производительности параллельных многосеточных методов декомпозиции областей

В данном пункте мы обсуждаем те предпосылки, которые необходимы для анализа и оптимизации предлагаемых алгоритмов. Под мерой эффективности алгоритма мы понимаем математические качества, которые можно назвать вычислительной ресурсоёмкостью, измеряемой количеством арифметических операций и объёмом памяти, необходимых для реализации, в зависимости от количества независимых переменных или числа степеней свободы (d.o.f.). Производительность — это технологическая характеристика, определяемая временем выполнения программного кода, реализующего рассматриваемый алгоритм на конкретной конфигурации ЭВМ. Повышение эффективности метода должно приводить к росту производительности соответствующей программы, но это бывает далеко не всегда.

В итерационных процессах общий объём вычислений зависит от количества итераций $n(\varepsilon)$ и от арифметической сложности одной итерации, при этом существенное значение имеет объём требуемой памяти и количество информационных обменов. Качество распараллеливания алгоритмов оценивается коэффициентами ускорения и эффективности использования процессоров

$$S_P = T_1(A)/T_P(A), \quad F_P = S_P/P,$$

где $T_P(A)$ — время выполнения задачи A на P процессорах, а P — их общее количество. Время T исполнения кода достаточно грубо характеризуется величинами

$$T^a = \tau_a N_a n(\varepsilon), \quad T^c = (\tau_0 N_l + \tau_c N_c)n(\varepsilon), \quad T^a + T^c = T.$$

Здесь $\tau_a \ll \tau_c \ll \tau_0$ суть средние времена выполнения одной операции, передачи одного числа и ожидания (настройки) одной транзакции на каждой итерации (их количество предполагается достаточно большим, например $n(\varepsilon) \geq 10$, так что временем однократно выполняемых операций до начала итераций можно пренебречь).

Если h есть характерный шаг d-мерной сетки, то общее количество узлов равно $N_h = O(h^{-d})$, где $d = 2, 3$ для двумерной и трёхмерной краевых задач соответственно, а количество итераций в "хорошем" алгоритме составляет $n(\varepsilon) = O(h^{-1/2})$ независимо от размерности d. Важно отметить, что в рассматриваемых методах декомпозиции областей, в отличие от классических методов, объём пересылаемой информации между подобластями и макросеткой составляет $N_c = O(h^{d-1})$ (естественно, число подобластей M мы считаем конечным и независящим от h).

Мы не вникаем глубоко в особенности архитектуры исследуемой многопроцессорной вычислительной системы (МВС), предполагая только, что реализация параллельных алгоритмов осуществляется средствами гибридного программирования: СЛАУ в подобластях формируется и решается с помощью библиотеки MPI распределённым образом на соединенных шинами вычислительных узлах, содержащих по несколько многопроцессорных CPU с общей памятью.

Решение СЛАУ в каждой из подобластей с помощью многосеточного метода неполной факторизации осуществляется в соответствии с рекомендациями предварительных экспериментальных исследований на трёх или четырёх вложенных сетках ($\Omega_m^{(l)}, l = 1, \ldots, L$). На этих этапах вычисления разбиваются на три стадии как для прямого, так и обратного хода факторизации, которые могут рассматриваться в качестве стадий редукции и пролонгации. Любая из этих стадий имеет дело только с одним или двумя типами узлов (рёберные, граневые, объёмные) и естественным образом распараллеливается путём разбиения каждой сеточной подобласти на K непересекающихся фрагментов. При относительно небольшом числе процессоров ($P = KM$ порядка нескольких десятков) ускорение S_P будет близко к линейному.

Множество узлов разделительной макросети можно структурно сформировать как одну подобласть на центральном вычислительном узле. Так как макросеть контактирует со всеми подобластями, для уменьшения экстремальной коммуникационной нагрузки её целесообразно разбить на несколько частей и передавать сообщения подобластям одновременно.

Открытым остается вопрос об оптимальном количестве формируемых подобластей. Очевидно, что при росте M подход ADDM в пределе перейдёт в многосеточный алгоритм, но навряд ли это будет оптимальным вариантом. Алгебраический аппарат исследования здесь достаточно сложен и на повестке дня стоят сравнительные экспериментальные исследования. Опубликованные в работах [7, 8] практические результаты являются достаточно обнадёживающими. Во-первых, число итераций по подобластям слабо зависит от их количества, на это и рассчитан изначально предлагаемый макросетевой подход. Во-вторых, многосеточная неполная факторизация действительно оказывается оптимальной по порядку, т. е. количество итераций практически не зависит от h, а общий объём вычислений пропорционален числу степеней свободы $N = O(h^{-d})$. Здесь полезно отметить следующее свойство предлагаемого алгоритма: минимальное число итераций оказывается в двухсеточном варианте, но он не является оптимальным по времени, так как прямой решатель на сетке $\Omega_m^{(2)}$ является слишком трудоёмким.

Полученные результаты для методических СЛАУ узлового типа открывают направления исследований с расширением класса задач и развития алгебро-геометрических подходов. В частности, чрезвычайно актуальными являются вопросы перехода на системы дифференциальных уравнений, применения аппроксимационных схем высокого порядка с более сложной структурой сеточных алгебраических уравнений и технологии построения алгоритмов на неструктурированных сетках, характерных для практических задач с реальными данными.

Литература

1. **Saad Y.** Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 2nd ed. — SIAM, 2003.
2. **Olshanskii M.A., Tyrtyshnikov E.E.** Iterative Methods for Linear Systems Theory and Applications. — Philadelphia: SIAM, 2014.
3. **Лаевский Ю.М., Мацокин А.М.** Методы декомпозиции решения эллиптических и параболических краевых задач // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 1999. — Т. 2, № 4. — С. 361–372.
4. **Ильин В.П.** Итерационные предобусловленные методы в подпространствах Крылова: тенденции XXI века // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2021. — Т. 61, № 11. — С. 1786–1813.
5. **Gurieva Ya.L., Il'in V.P., Kozlov D.I.** Parallel domain decomposition methods with graph preconditioning // Тр. конф. "Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2023)". — Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2023. — https://doi.org/10.14529/pct2023.
6. **Il'in V.P.** Multigrid incomplete factorization methods in Krylov subspaces // J. Math. Sci. — 2023. — Vol. 272. — P. 523–532.
7. **Кузнецов Ю.А.** Алгебраические многосеточные методы декомпозиции области. — Москва, 1989. — (Препринт / АН СССР. Отд. вычисл. математики; 232).
8. **Bank R., Falgout R., Jones T., et al.** Algebraic multigrid domain and range decomposition (AMG-DD/AMG-RD) // SIAM J. Sci. Comput. — 2015. — Vol. 37. — P. 113–136.
9. **Ильин В.П.** Методы и технологии конечных элементов. — Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2007.
10. **Ильин В.П.** Математическое моделирование. Ч. 1. Непрерывные и дискретные модели. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017.

11. **Agoshkov V.I., Lebedev V.I.** Variational algorithms of the domain decomposition method // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1990. — Vol. 5, № 1. — P. 27–46.
12. **Dolean V., Jolivet P., Nataf F.** An Introduction to Domain Decomposition Methods: Algorithms, Theory and Parallel Implementation. — Philadelphia: SIAM, 2015.
13. **Korneev V.G.** Fast domain decomposition algorithms for elliptic problems with piecewise variable orthotropies // Advanced Finite Element Methods and Applications / T. Apel, O. Steinbach. — Berlin, Heidelberg: Springer, 2013. — P. 57–89. — (Lect. Notes in Applied and Computational Mechanics; 66).
14. **Непомнящих С.В.** Методы декомпозиции области и фиктивного пространства: Дис. ... докт. физ.-мат. наук: 01.01.07. — Новосибирск: РИЦ НГУ, 2008.
15. **Ильин В.П., Кузнецов Ю.И.** Трёхдиагональные матрицы и их приложения. — М.: Наука, 1985.
16. **Капорин И.Е., Милюкова О.Ю.** Неполное обратное треугольное разложение в параллельных алгоритмах предобусловленного метода сопряжённых градиентов. — Москва, 2017. — (Препринт / ИПМ им. М.В. Келдыша; 37).
17. **Anzt H., Huckle T.K., Bräckle J., Dongarra J.** Incomplete sparse approximate inverses for parallel preconditioning // Parallel Computing. — 2018. — Vol. 71. — P. 1–22.
18. **Reusken A.** A multigrid method based on incomplete gaussian elimination // Numer. Linear. Alg. Appl. — 1996. — Vol. 3. — P. 369–390.
19. **Bank R.E., Dupont T.F., Yserentant H.** The hierarchical basis multigrid method // Numer. Math. — 1988. — Vol. 52. — P. 427–458.
20. **Hackbusch W., Khoromskij B.N., Kriemann R.** Direct Schur complement method by domain decomposition based on h-matrix approximation // Comput. Visual. Sci. — 2005. — Vol. 8, № 3. — P. 179–188. — doi:10.1007/s00791-005-0008-3.
21. **Василевский Ю.В., Ольшанский М.А.** Краткий курс по многосеточным методам и методам декомпозиции области. — М.: МГУ, 2007.
22. **Notay Y.** Flexible conjugate gradients // SIAM J. Sci. Comput. — 2000. — Vol. 22, № 4. — P. 1444–1460.

Поступила в редакцию 29 ноября 2024 г.
После рецензирования без замечаний 6 декабря 2024 г.
Принята к печати 15 января 2025 г.

Литература в транслитерации

1. **Saad Y.** Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 2nd ed. — SIAM, 2003.
2. **Olshanskii M.A., Tyrtyshnikov E.E.** Iterative Methods for Linear Systems Theory and Applications. — Philadelphia: SIAM, 2014.
3. **Laevskii Yu.M., Matsokin A.M.** Metody dekompozitsii resheniya ellipticheskih i parabolicheskih kraevyh zadach // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 1999. — T. 2, № 4. — S. 361–372.
4. **Il'in V.P.** Iteratsionnye predobuslovlennye metody v podprostranstvah Krylova: tendentsii XXI veka // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2021. — T. 61, № 11. — C. 1786–1813.
5. **Gurieva Ya.L., Il'in V.P., Kozlov D.I.** Parallel domain decomposition methods with graph preconditioning // Tr. konf. "Parallel'nye vychislitel'nye tekhnologii (PaVT'2023)". — Chelyabinsk: Izdatel'skii tsentr YuUrGU, 2023. — https://doi.org/10.14529/pct2023.

6. **Il'in V.P.** Multigrid incomplete factorization methods in Krylov subspaces // J. Math. Sci. — 2023. — Vol. 272. — P. 523–532.
7. **Kuznetsov Yu.A.** Algebraicheskie mnogosetochnye metody dekompozitsii oblasti. — Moskva, 1989. — (Preprint / AN SSSR. Otd. vychisl. matematiki; 232).
8. **Bank R., Falgout R., Jones T., et al.** Algebraic multigrid domain and range decomposition (AMG-DD/AMG-RD) // SIAM J. Sci. Comput. — 2015. — Vol. 37. — P. 113–136.
9. **Il'in V.P.** Metody i tekhnologii konechnyh elementov. — Novosibirsk: Izd-vo IVMiMG SO RAN, 2007.
10. **Il'in V.P.** Matematicheskoe modelirovanie. Ch. 1. Nepreryvnye i diskretnye modeli. — Novosibirsk: Izd-vo SO RAN, 2017.
11. **Agoshkov V.I., Lebedev V.I.** Variational algorithms of the domain decomposition method // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1990. — Vol. 5, № 1. — P. 27–46.
12. **Dolean V., Jolivet P., Nataf F.** An Introduction to Domain Decomposition Methods: Algorithms, Theory and Parallel Implementation. — Philadelphia: SIAM, 2015.
13. **Korneev V.G.** Fast domain decomposition algorithms for elliptic problems with piecewise variable orthotropies // Advanced Finite Element Methods and Applications / T. Apel, O. Steinbach. — Berlin, Heidelberg: Springer, 2013. — P. 57–89. — (Lect. Notes in Applied and Computational Mechanics; 66).
14. **Nepomnyaschih S.V.** Metody dekompozitsii oblasti i fiktivnogo prostranstva: Dis. ... dokt. fiz.-mat. nauk: 01.01.07. — Novosibirsk: RITS NGU, 2008.
15. **Il'in V.P., Kuznetsov Yu.I.** Trekhdiagonal'nye matritsy i ih prilozheniya. — M.: Nauka, 1985.
16. **Kaporin I.E., Milyukova O.Yu.** Nepolnoe obratnoe treugol'noe razlozhenie v parallel'nyh algoritmah predobuslovlennogo metoda sopryazhennyh gradientov. — Moskva, 2017. — (Preprint / IPM im. M.V. Keldysha; 37).
17. **Anzt H., Huckle T.K., Bräckle J., Dongarra J.** Incomplete sparse approximate inverses for parallel preconditioning // Parallel Computing. — 2018. — Vol. 71. — P. 1–22.
18. **Reusken A.** A multigrid method based on incomplete gaussian elimination // Numer. Linear. Alg. Appl. — 1996. — Vol. 3. — P. 369–390.
19. **Bank R.E., Dupont T.F., Yserentant H.** The hierarchical basis multigrid method // Numer. Math. — 1988. — Vol. 52. — P. 427–458.
20. **Hackbusch W., Khoromskij B.N., Kriemann R.** Direct Schur complement method bu domain decomposition based on h-matrix approximation // Comput. Visual. Sci. — 2005. — Vol. 8, № 3. — P. 179–188. — doi:10.1007/s00791-005-0008-3.
21. **Vasilevskii Yu.V., Ol'shanskii M.A.** Kratkii kurs po mnogosetochnym metodam i metodam dekompozitsii oblasti. — M.: MGU, 2007.
22. **Notay Y.** Flexible conjugate gradients // SIAM J. Sci. Comput. — 2000. — Vol. 22, № 4. — P. 1444–1460.