А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич, Итерационные методы кластерного агрегирования для систем линейных уравнений, *Докл. РАН*, 1996, том 349, номер 1, 22–25

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 1996, том 349, № 1, с. 22–25

МАТЕМАТИКА

УДК 519.63

ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ КЛАСТЕРНОГО АГРЕГИРОВАНИЯ ДЛЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

© 1996 г. Академик А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич

Поступило 11.03.96 г.

Теория итерационных методов решения систем линейных уравнений развивается в различных направлениях [1–4]. При ориентации на современные параллельные ЭВМ [5] успех достигается за счет использования классических блочных итерационных методов, многоцветного упорядочения неизвестных. При решении эллиптических краевых задач рассматриваются подходы с декомпозицией (разделением) области на подобласти с наложением и без наложения подобластей друг на друга [6, 7]. Примером выступает классический альтернирующий метод Шварца. Методы декомпозиции области на матричном уровне могут рассматриваться как специальные итерационные методы блочного типа.

В данной работе выделяется класс итерационных методов со специальной организацией вычислений, типичной для классических блочных методов. Уравнения системы после предварительной обработки (например, после масштабирования) объединяются в отдельные группы. Причем одно и то же уравнение может входить в различные группы, которые мы называем кластерами. Для симметричной линейной системы уравнений показана сходимость итерационных методов кластерного агрегирования. Приведены примеры таких методов, которые связываются с методами точечной и блочной релаксации, блочными итерационными методами, итерационными методами многоцветного разбиения и т.д. Среди наиболее важных примеров методов кластерного агрегирования выделим итерационные методы декомпозиции области типа Шварца.

1. Ищется решение системы линейных уравнений

$$Ay = f, \qquad (1)$$

где A – вещественная невырожденная квадратная матрица $n \times n$, f, y – заданный и искомый вещественные векторы с компонентами f_i, y_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, соответственно. Определим через H конечномерное вещественное гильбертово пространство со скалярным произведением и нормой

$$(u, v) = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i, \quad \|u\| = (u, u)^{1/2}.$$

Пусть в (1) $A = A^* > 0$ – линейный самосопряженный положительный в H оператор (симметричная положительно-определенная матрица). Через H_D, $D = D^* > 0$ будем обозначать гильбертово пространство, снабженное скалярным произведением $(u, v)_D = (Du, v)$ и нормой $\|u\|_D = (u, u)_D^{1/2}$.

Рассматривается класс итерационных методов, основанный на объединении (агрегировании) отдельных уравнений системы (1) в отдельные группы (кластеры). Примером такого подхода могут служить классические блочные методы линейной алгебры.

Будем считать, что из n уравнений системы (1) формируется p кластеров. Выделение уравнений в отдельную группу формализуется в виде

$$G^\alpha A y = G^\alpha f, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, p, \qquad (2)$$

где G^α – операторы агрегирования, α – номер кластера. Будем считать, что в (2) $G^\alpha = (G^\alpha)^* \geq 0$ и $\sum_{\alpha=1}^{p} G^\alpha > 0$.

Пусть y – некоторый вектор, который удовлетворяет (2). Тогда суммирование по всем α дает

$$\bar{G} A y = \bar{G} f, \quad \bar{G} = \sum_{\alpha=1}^{p} G^\alpha.$$

В наших предположениях $\bar{G} > 0$, и поэтому всякое решение (2) есть не что иное, как единственное искомое решение исходной системы уравнений (1).

Наиболее естественное объединение отдельных уравнений системы (1) в группы, которое сочетается с масштабированием, позволяет записать операторы агрегирования следующим образом:

$$G^\alpha = \chi^\alpha E, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, p, \qquad (3)$$

Институт математического моделирования Российской Академии наук, Москва

где E – единичная матрица, а χ^α – некоторые векторы.

При агрегировании (2), (3) компоненты векторов χ^α, $\alpha = 1, 2, \ldots, p$, неотрицательны, т.е.

$$\chi_i^\alpha \ge 0,\ i = 1, 2, \ldots, n,\ \sum_{i=1}^{n} \chi_i^\alpha > 0, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, p. \tag{4}$$

Равенство нулю i-й компоненты вектора χ^α, $\chi_i^\alpha = 0$, означает что i-е уравнение системы (1) не включается в кластер под номером α. Обычные блочные методы соответствуют тому, что

$$(\chi^\alpha, \chi^\beta) = \begin{cases} >0, & \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \ne \beta, \end{cases}$$

и ненулевые компоненты векторов χ^α равны единице (блочное разбиение без масштабирования).

2. Для приближенного решения системы уравнений (1) будем использовать итерационный метод, который основан на кластерном агрегировании в соответствии с (2)–(4). Поэтому методы данного класса будем называть итерационными методами кластерного агрегирования, или методами СА (Cluster Aggregation).

Переход с приближения y^k на новое приближение y^{k+1} осуществляется на основе решения p задач, которые соответствуют кластерному разбиению. Приближенное решение, отнесенное к кластеру с номером α, обозначим $y^{k+\alpha/p}$. Сначала остановимся на методе, когда $y^{k+\alpha/p}$ определяются последовательно друг за другом по мере возрастания номера α (синхронный итерационный метод).

Приближенное решение $y^{k+\alpha/p}$ будем определять на основе найденного ранее решения $y^{k+(\alpha-1)/p}$ по аналогии с локально-одномерными разностными схемами (схемами покомпонентного расщепления) [8, 9]. Положим

$$(\mu E + G^\alpha A)\frac{y^{k+\alpha/p} - y^{k+(\alpha-1)/p}}{\tau} + G^\alpha A y^{k+(\alpha-1)/p} = G^\alpha f, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, p, \tag{5}$$

где $\tau > 0$ – итерационный параметр, μ – некоторая положительная постоянная.

Принимая во внимание (4), из (5) имеем при любом $\mu > 0$ равенство $y_i^{k+\alpha/p} = y_i^{k+(\alpha-1)/p}$ для тех компонент, для которых $\chi_i^\alpha = 0$. Тем самым каждый раз уточняются только те компоненты решения, которые отнесены к соответствующему кластеру. На основе общей теории итерационных методов формулируются достаточные условия сходимости итерационного метода СА (5).

Теорема 1. *Итерационный метод кластерного агрегирования* (2), (5), *с* $G^\alpha = (G^\alpha)^* \ge 0$, $\sum_{\alpha=1}^{p} G^\alpha > 0$ *сходится в* H_A *при любых* $0 < \tau < 2$.

Для доказательства рассмотрим задачу для погрешности $z^{k+\alpha/p} = y^{k+\alpha/p} - y$, $\alpha = 1, 2, \ldots, p$:

$$(\mu E + G^\alpha A)\frac{z^{k+\alpha/p} - z^{k+(\alpha-1)/p}}{\tau} + G^\alpha A z^{k+(\alpha-1)/p} = 0. \tag{6}$$

Домножим уравнение (6) на A и запишем его в виде

$$\mu A(v^\alpha)_{\bar t} + AG^\alpha A\left(\frac{1}{\tau}v^\alpha + \left(1 - \frac{1}{\tau}\right)v^{\alpha-1}\right) = 0, \tag{7}$$

где

$$v^\alpha = z^{k+\alpha/p},\ (v^\alpha)_{\bar t} = \frac{v^\alpha - v^{\alpha-1}}{\tau}.$$

Домножим (7) скалярно на

$$2\tau w^\alpha = 2v^\alpha + (2\tau - 2)v^{\alpha-1} = \tau(v^\alpha + v^{\alpha-1}) - (\tau - 2)\tau(v^\alpha)_{\bar t},$$

что дает равенство

$$\mu\|v^\alpha\|_A^2 - \mu\|v^{\alpha-1}\|_A^2 + (2-\tau)\tau\mu\|(v^\alpha)_{\bar t}\|_A^2 + 2\tau(G^\alpha Aw^\alpha, Aw^\alpha) = 0$$

при каждом $\alpha = 1, 2, \ldots, p$. Складывая эти уравнения, получим

$$\mu\|v^p\|_A^2 - \mu\|v^0\|_A^2 + (2-\tau)\tau\mu\sum_{\alpha=1}^{p}\|(v^\alpha)_{\bar t}\|_A^2 \le 0.$$

Легко устанавливается, что

$$\sum_{\alpha=1}^{p}\|(v^\alpha)_{\bar t}\|_A^2 > 0.$$

Равенство нулю этой суммы имеет место при $v^\alpha = z^{k+\alpha/p} = z^k$, т.е. с учетом уравнения (6) только при $G^\alpha A z^k = 0$, $\alpha = 1, 2, \ldots, p$ (при $z^k = 0$). Отсюда с учетом (4) при $0 < \tau < 2$ получим в исходных обозначениях

$$\|z^{k+1}\|_A < \|z^k\|_A, \tag{8}$$

т.е. итерационный метод (5) сходится в H_A.

Тем самым установлена сходимость итерационного метода СА в достаточно общих условиях агрегации (2). Важнейший вопрос об исследовании скорости сходимости, ее зависимости от векторов χ^α, $\alpha = 1, 2, \ldots, r$ (от масштабирования), и числового параметра μ каждого конкретного метода агрегирования требует более содержательного анализа. Аналогичное замечание относится к также не затрагиваемой здесь проблеме оптимального выбора итерационного параметра τ или переменных итерационных параметров $\tau_{k+\alpha/p}$.

3. В случае построения вычислительных алгоритмов для современных параллельных ЭВМ отдельного внимания заслуживают асинхронные варианты итерационных методов кластерного агрегирования. Отметим некоторые имеющиеся возможности в этом направлении исследований.

Определим векторы $\tilde{y}^{k+(\alpha-1)/p}$ из уравнений (аналог аддитивно-усредненной схемы покомпонентного расщепления [9])

$$(\mu E + G^\alpha A)\frac{\tilde{y}^{k+\alpha/p} - y^k}{\tau} + G^\alpha A y^k = G^\alpha f, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, p. \tag{9}$$

Для приближения на $(k+1)$-й итерации будем использовать выражение

$$y^{k+1} = \frac{1}{p}\sum_{\alpha=1}^{p} \tilde{y}^{k+\alpha/p}. \tag{10}$$

Принципиальным отличием алгоритма (9), (10) от (5) является то, что вычисления $\tilde{y}^{k+\alpha/p}$, $\alpha = 1, 2, \ldots, p$, могут проводиться независимо (асинхронно) друг от друга с использованием только итерационного приближения y^k. Сходимость такого варианта устанавливается при тех же условиях, что и для ранее рассмотренного (синхронного) варианта методом СА (5).

Теорема 2. *Итерационный метод кластерного агрегирования* (2), (9), (10) *с* $G^\alpha = (G^\alpha)^* \ge 0$, $\sum_{\alpha=1}^{p} G^\alpha > 0$ *сходится в* H_A *при любых* $0 < \tau < 2$.

Подобно доказательству теоремы 1 при сформулированных ограничениях на τ имеем

$$\mu\|\tilde{z}^{k+\alpha/p}\|_A^2 - \mu\|z^k\|_A^2 + 2\tau(G^\alpha A w^\alpha, A w^\alpha) \le 0,$$

где теперь $\tau w^\alpha = \tilde{z}^{k+\alpha/p} + (\tau - 1)z^k$, $\tilde{z}^{k+\alpha/p} = \tilde{y}^{k+\alpha/p} - y$. Заметим также, что хотя бы при одном α последнее неравенство строгое. Принимая во внимание, что в силу (10)

$$\|z^{k+1}\|_A^2 \le \frac{1}{p}\sum_{\alpha=1}^{p}\|\tilde{z}^{k+\alpha/p}\|_A^2,$$

придем к доказываемой оценке (8).

Если синхронные варианты метода СА можно рассматривать как аналогии итерационных процедур типа Зейделя, то асинхронный вариант естественно связать с итерационными методами типа Якоби. За возможность организации параллельных вычислений необходимо платить, вообще говоря, более медленной скоростью сходимости.

4. Отметим некоторые возможности построения итерационных методов кластерного агрегирования, связывая их с тем или иным выбором операторов агрегирования в соответствии с (3), (4).

Точечные методы СА связаны с выделением в отдельную группу каждого уравнения системы (1). В этом случае

$$\chi_i^\alpha = \begin{cases} >0, & i = \alpha, \\ 0, & i \ne \alpha. \end{cases}$$

При использовании итерационного метода (5) в этом случае уточняется значение отдельной компоненты вектора. Мы фактически имеем итерационный метод типа классического метода релаксации. К стандартному варианту метода релаксации мы приходим при задании

$$\chi_i^i = a_{ii}^{-1}, \quad i = \alpha = 1, 2, \ldots, n,$$

и согласованном выборе параметров μ и τ. Необходимо только отметить, что в нашем рассмотрении участвуют не только приближения y^k и y^{k+1}, но и промежуточные $y^{k+\alpha/p}$, $\alpha = 1, 2, \ldots, p-1$. Асинхронный вариант точечного метода СА связывается с классическим итерационным методом Якоби.

Значительно больший интерес представляют блочные методы СА. В этом случае группа включает несколько уравнений системы (1) и каждое из уравнений входит в какую-нибудь группу. Среди блочных методов заслуживают отдельного упоминания многоцветные итерационные методы при решении сеточных задач для многомерных задач математической физики. Например, красно-черное упорядочивание соответствует двухкластерному разбиению ($p = 2$), при котором

$$\chi_i^1 = \begin{cases} >0, & i = 2m, \\ 0, & i = 2m-1, \end{cases} \qquad \chi_i^2 = \begin{cases} >0, & i = 2m-1, \\ 0, & i = 2m. \end{cases}$$

В более общем случае одни и те же уравнения включаются в различные группы. Примером служат методы типа декомпозиции областей с налеганием (аналоги классического альтернирующего метода Шварца) для приближенного решения задач математической физики. При агрегировании (3), (4) методам СА с наложением соответствуют варианты при $(\chi^\alpha, \chi^\beta) > 0$ для любых $\alpha, \beta = 1, 2, \ldots, p$.

Среди наиболее принципиальных обобщений рассматриваемого класса итерационных методов кластерного агрегирования отметим возможность рассмотрения более общих сеточных задач (1) с несамосопряженным положительным оператором A.

Результаты работы докладывались на Международной конференции по итерационным методам линейной алгебры (Болгария, Благоевград, июнь 1995 г.). Она выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 96–01–00657).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Varga R.S.* Matrix Iterative Analysis. Englewood Cliffs, New Jersy: Prentice-Hall, 1962.
2. *Young D.M.* Iterative Solution of Large Linear Systems. N.Y.: Acad. Press, 1971.
3. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
4. *Hageman L.A., Young D.M.* Applied Iterative Methods. N.Y.: Acad. Press, 1981.
5. *Ortega J.M.* Introduction to Parallel and Vector Solution of Linear Systems. N.Y.: Plenum Press, 1988.
6. Domain decomposition methods in Science and Engineering / A. Quarteroni, J. Periaux, Yu. Kuznetsov, O.B. Widlund, Eds. Providence: AMS, 1994.
7. *Tallec P.Le.* // Computational Mech. Adv. 1994. V. 1. № 2. P. 121–220.
8. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
9. *Samarskii A.A., Vabishchevich P.N.* Computational Heat Transfer. Chichester: Wiley, 1995. V. 1/2.