Лекции 7-8: Многоуровневый метод

1 Неполная факторизация

Решаем систему вида

$$Ax = b, \tag{1}$$

где $A \in \mathcal{R}^{N\times N}$ матрица, $x, b \in \mathcal{R}^N$ вектора. Для решения системы представим ее в блочном виде:

$$A = \begin{bmatrix} B & F \\ E & C \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} u \\ y \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}, \tag{2}$$

где $B \in \mathcal{R}^{K\times K}$, $C \in \mathcal{R}^{L\times L}$, $F, E^T \in \mathcal{R}^{K\times L}$, $K + L = N$. Так же возможно применение переупорядочивания $A = P^T AQ$, которое приводит систему к блочному виду, такому, что блок B является невырожденным и хорошо обусловленным.

Тогда система принимает вид:

$$\begin{bmatrix} B & F \\ E & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}. \tag{3}$$

После K шагов ILU-факторизации блочное LDU разложение имеет вид:

$$\begin{bmatrix} B & F \\ E & C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{L}_B & \\ \tilde{L}_E & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{D}_B & \\ & \tilde{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{U}_B & \tilde{U}_F \\ & \mathbf{I} \end{bmatrix} + \mathcal{E}_K = \tilde{\mathcal{L}}_K \tilde{\mathcal{D}}_K \tilde{\mathcal{U}}_K + \mathcal{E}_K, \tag{4}$$

где $\tilde{L}_B, \tilde{U}_B^T$ - нижние треугольные матрицы, $\tilde{D}_B$ - диагональная матрица, а $\tilde{S} \approx S = C - EB^{-1}F$ - приближение к дополнению по Шуру. Существует два подхода к вычислению дополнения по Шуру $\tilde{S}$:

- S-версия: $\tilde{S} = \; - \tilde{L}_E \tilde{D}_E \tilde{U}_F$.
- T-версия: $\tilde{T} = \begin{bmatrix} -\tilde{L}_E \tilde{L}_B^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} -\tilde{U}_B^{-1}\tilde{U}_F \\ \mathbf{I} \end{bmatrix}$.

Замечание 1.1. *Второй подход является аналогичным вычислению оператора Галеркина в алгебраическом многосеточным методе с приближением к идеальным операторам сужения* $R = \begin{bmatrix} -EB^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix}$ *и пролонгации* $P = \begin{bmatrix} -B^{-1}F & \mathbf{I} \end{bmatrix}^T$.

Пусть $\tilde{\mathcal{L}}_{l-1}\tilde{\mathcal{D}}_{l-1}\tilde{\mathcal{U}}_{l-1}$ известно. Рассмотрим вычисление l-го шага факторизации с отбрасыванием столбца $\beta\mathbf{v}$ из l-го столбца L (обозначим $\mathbf{e}$) и строки $\beta\mathbf{w}$ из l-ой строки U (обозначим $\mathbf{f}^T$):

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{L}}_l \tilde{\mathcal{D}}_l \tilde{\mathcal{U}}_l &= \begin{bmatrix} \tilde{L}_{B_{l-1}} & \\ \tilde{L}_{E_{l-1}} & \begin{bmatrix} 1 & \\ \frac{\mathbf{e}}{\beta} - \mathbf{v} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \tilde{D}_{B_{l-1}} & \\ & \begin{bmatrix} \beta & \\ & \tilde{S}_l \end{bmatrix} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \tilde{U}_{B_{l-1}} & \tilde{U}_{F_{l-1}} \\ & \begin{bmatrix} 1 & \frac{\mathbf{f}^T}{\beta} - \mathbf{w}^T \\ & \mathbf{I} \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} \tilde{L}_{B_{l-1}} & \\ \tilde{L}_{E_{l-1}} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \tilde{D}_{B_{l-1}} & \\ & \begin{bmatrix} \beta & \mathbf{f}^T - \beta\mathbf{w} \\ \mathbf{e} - \beta\mathbf{v} & \hat{C} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \tilde{U}_{B_{l-1}} & \tilde{U}_{F_{l-1}} \\ & \mathbf{I} \end{bmatrix} = \\
&= \tilde{\mathcal{L}}_{l-1}\tilde{\mathcal{D}}_{l-1}\tilde{\mathcal{U}}_{l-1} - \hat{\mathbf{v}}\beta\mathbf{e}_l^T - \mathbf{e}_l\beta\hat{\mathbf{w}}^T,
\end{aligned} \tag{5}$$

где $\mathbf{e}_l = [0 \dots 1 \dots 0]^T$ - вектор с единицой в позиции l, а $\hat{\mathbf{v}}$ и $\hat{\mathbf{w}}^T$ векторы $\mathbf{v}$ и $\mathbf{w}^T$, дополненные вначале $l-1$ нулем.

Данная факторизация аналогична IKJ-версии вычисления факторизации, в которой на каждом шаге исключений выполняется одноранговые исключения из правого-нижнего блока матрицы.

В результате отбрасывания дополнение по Шуру имеет вид

- S-версия: $\tilde{S}_l = \hat{C} - (\mathbf{e} - \beta\mathbf{v})\beta^{-1}(\mathbf{f} - \beta\mathbf{w})^T$,
- T-версия: $\tilde{T}_l = \begin{bmatrix} -\frac{\mathbf{e}}{\beta} + \mathbf{v} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \tilde{S}_{l-1} \begin{bmatrix} -\frac{\mathbf{f}}{\beta} + \mathbf{w} & \mathbf{I} \end{bmatrix} = \hat{C} - \frac{\mathbf{e}\mathbf{f}^T}{\beta} + \beta\mathbf{v}\mathbf{w}^t$.

Обозначим матрицу всех отбрасываний из L и U за $\mathcal{V} \in \mathcal{R}^{N\times N}$ и $\mathcal{W} \in \mathcal{R}^{N\times N}$. На l-ом шаге исключения заполняется столбец $\mathcal{V}_l = \mathcal{V}_{l-1} + \hat{\mathbf{v}}\mathbf{e}_l^T$ в матрице $\mathcal{V}$ и строка $\mathcal{W}_l = \mathcal{W}_{l-1} + \mathbf{e}_l\hat{\mathbf{w}}^T$.

Лемма 1.1. *Ошибка факторизации $\mathcal{E}_K$ после K шагов факторизации имеет вид*

- *S-версия:* $\mathcal{E}_K = \mathcal{V}_K\tilde{D}_{B_K} + \tilde{D}_{B_K}\mathcal{W}_K$.
- *T-версия:* $\mathcal{E}_K = \mathcal{V}_K\tilde{D}_{B_K}\tilde{\mathcal{U}}_K + \tilde{\mathcal{L}}_K\tilde{D}_{B_K}\mathcal{W}_K$

Ошибка обращения $\mathcal{F}_K$, важная при применении метода в качестве предобуславливателя, имеет вид: $\mathcal{F}_K = \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\mathcal{E}_K\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1}$.

Следствие 1.1. *Согласно лемме 1.1 ошибка обращения $\mathcal{F}_K$ имеет вид:*

- *S-версия:* $\mathcal{F}_K = \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\mathcal{V}_K\tilde{D}_{B_K}\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} + \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\tilde{D}_{B_K}\mathcal{W}_K\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1}$.
- *T-версия:* $\mathcal{F}_K = \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\mathcal{V}_K\tilde{D}_{B_K} + \tilde{D}_{B_K}\mathcal{W}_K\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1}$

В $\mathcal{V}_K$ заполнены только первые K строк, а в $\mathcal{W}_K$ - только первые K столбцов. Таким образом, в результате отбрасывания для T-версии нет ошибки в правом нижнем блоке, чего нельзя сказать про S-версию.

Следствие 1.2. *Предположим*[1]*, что $\|\tilde{\mathcal{L}}_l^{-1}\| \le \kappa$ и $\|\tilde{\mathcal{U}}_l^{-1}\| \le \kappa$ на шагах $l = 1, \dots, K$, где $\kappa > 0$ - заданная константа. Обозначим $\tilde{d}_l$ - ведущий диагональный элемент в приближении к дополнению по Шуру на шаге l.*

- *S-версия: пусть $\tilde{s}_{lj}$ и $\tilde{s}_{il}$ для $i, j > l$ - значения в строке и столбце в дополнении по Шуру. Предположим, что они отбрасываются при условии, что*
$$\kappa^2|\tilde{s}_{lj}| \ge \epsilon|\tilde{d}_l|, \quad \kappa^2|\tilde{s}_{il}| \ge \epsilon|\tilde{d}_l|, \tag{6}$$
тогда ошибка обращения $\mathcal{F}_K = \sum_l^K \mathcal{F}_{L,l} + \sum_l^K \mathcal{F}_{U,l}$, где $\mathcal{F}_{L,l}$ и $\mathcal{F}_{U,l}$ одноранговые матрицы, чьи значения ограничены $\epsilon|\tilde{d}_l|$.
- *T-версия: пусть $\tilde{t}_{lj}$ и $\tilde{t}_{il}$ для $i, j > l$ - значения в строке и столбце в дополнении по Шуру. Предположим, что они отбрасываются при условии, что*
$$\kappa|\tilde{t}_{lj}| \ge \epsilon|\tilde{d}_l|, \quad \kappa|\tilde{t}_{il}| \ge \epsilon|\tilde{d}_l|, \tag{7}$$
тогда ошибка обращения $\mathcal{F}_K = \mathcal{F}_{L,K}\tilde{\mathcal{D}}_{B_K} + \tilde{\mathcal{D}}_{B_K}\mathcal{F}_{U,K}$, где
$$\begin{aligned} \max_{i,j}\left(\mathbf{e}_i^T\mathcal{F}_{L,K}\mathbf{e}_j\right) &\le \epsilon, \\ \max_{i,j}\left(\mathbf{e}_i^T\mathcal{F}_{U,K}\mathbf{e}_j\right) &\le \epsilon. \end{aligned} \tag{8}$$

[1]Вычисление норм обратных факторов рассматривалось в лекции про неполную факторизацию.

2 Многоуровневый метод

М-версия факторизации:

- S-версия факторизации до шага K для выполнения исключений [2].
- Т-версия факторизации на шаге K для вычисления дополнения по Шуру.

Обозначим систему на верхнем уровне за $A_1 = A$. Многоуровневый метод факторизации на основе М-версии:

1. Зададим $\eta = 1$.
2. Переупорядочиваем и масштабируем систему $D_L P^T A_\eta Q D_R = \begin{bmatrix} B & F \\ E & C \end{bmatrix}$
3. Выполним факторизацию до шага K:
$$\begin{bmatrix} B & F \\ E & C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{L}_B & \\ \tilde{L}_E & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{D}_B & \\ & \tilde{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{U}_B & \tilde{U}_F \\ & \mathbf{I} \end{bmatrix} + \mathcal{E}_K \tag{9}$$
4. Вычислим дополнение по Шуру при помощи Т-версии:
$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} -\tilde{L}_E \tilde{L}_B^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} -\tilde{U}_B^{-1}\tilde{U}_F \\ \mathbf{I} \end{bmatrix}. \tag{10}$$
5. Обозначим $A_{\eta+1} = \tilde{M}$.
6. Если $A_{\eta+1}$ велико для прямой факторизации, то
   - увеличим $\eta = \eta + 1$ и вернемся на второй шаг,
   - иначе посчитаем $A_{\eta+1}^{-1}$ и остановимся.

Замечание 2.1. *При выполнении факторизации для всей матрицы A с оценкой норм обратных факторов можно считать факторизованными только те строки, для которых выполнено $\|\mathcal{L}_l^{-1}\| \le \kappa$ и $\|\mathcal{U}_l^{-1}\| \le \kappa$, а остальные строки считать не факторизованными и пропускать в процессе выполнения исключений. После факторизации переупорядочим матрицу таким образом, чтобы для первых K строк выполнялось $\|\mathcal{L}_K^{-1}\| \le \kappa$ и $\|\mathcal{U}_K^{-1}\| \le \kappa$, что позволит выполнить условия следствия 1.2.*

Следствие 2.1. *Согласно лемме 1.1 ошибка обращения имеет вид:*

- *М-версия:*
$$\mathcal{F}_K = \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\mathcal{V}_K\tilde{D}_{B_K}\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} + \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\tilde{D}_{B_K}\mathcal{W}_K\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} \quad -\Pi\left(\tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\mathcal{V}_K\tilde{D}_{B_K}\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} + \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1}\tilde{D}_{B_K}\mathcal{W}_K\tilde{\mathcal{U}}_K^{-1}\right)\Pi, \tag{11}$$
где $\Pi = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \\ & \mathbf{I} \end{bmatrix}$ и $\mathbf{0}$ - матрица размера $K \times K$.

Таким образом, для М-версии нет ошибки в правом нижнем блоке.

В факторизации (9) можно отказаться от вычисленных с отбрасыванием $\tilde{L}_E$ и $\tilde{U}_B$. Тогда факторизация

$$\begin{bmatrix} B & F \\ E & C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{L}_B & \\ E\tilde{U}_B^{-1}\tilde{D}_B^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{D}_B & \\ & \tilde{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{U}_B & \tilde{D}_B^{-1}\tilde{L}_B^{-1}F \\ & \mathbf{I} \end{bmatrix} + \mathcal{E}_K, \tag{12}$$

[2] Исключения могут выполняться при помощи факторизации Краута, которая не строит дополнения по Шуру.

фактически мы учитываем только отбрасывания в левом-верхнем блоке.

Тогда ошибка имеет вид $\mathcal{E}_K = \begin{bmatrix} * & \\ & * \end{bmatrix}$.

Представим матрицы отбрасывания в блочном виде:

$$\mathcal{V}_K = \begin{bmatrix} V_B & \\ V_E & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \mathcal{W}_K = \begin{bmatrix} W_B & W_F \\ & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \tag{13}$$

где $\mathbf{0}$ - нулевая матрица размера $L \times L$.

Теорема 2.1. *Допустим, что факторизация выполняется по формуле* (12). *Пусть матрицы отбрасывания* $\mathcal{V}_K$ *и* $\mathcal{W}_K$ *имеют вид* (13). *Тогда ошибка обращения имеет вид:*

- *S-версия:*

$$\mathcal{F}_K = \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1} \begin{bmatrix} V_B\tilde{D}_B + \tilde{D}_B W_B & \\ & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} \tag{14}$$

- *M-версия:*

$$\mathcal{F}_K = \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1} \begin{bmatrix} V_B\tilde{D}_B + \tilde{D}_B W_B & \\ & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} \quad -\Pi \tilde{\mathcal{L}}_K^{-1} \begin{bmatrix} V_B\tilde{D}_B + \tilde{D}_B W_B & \\ & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} \Pi \tag{15}$$

Для T-версии вид $\mathcal{F}_K$ сложный, но отсутствие влияния отбрасывания на правый-нижний блок потеряется.

2.1 Ошибка с нижних уровней

Допустим, что в результате неполной факторизации после упорядочивания $P_C^T \tilde{S} Q_C = L_C D_C U_C + \mathcal{E}_C$ на грубом уровне имеем ошибку обращения $\mathcal{F}_C = L_C^{-1} \mathcal{E}_C U_C^{-1}$.

Тогда ошибка обращения на верхнем уровне принимает вид:

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \\ & L_C^{-1} P_C^T \end{bmatrix} \mathcal{L}_K^{-1} A \mathcal{U}_K^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \\ & Q_C U_C^{-1} \end{bmatrix} = \\ &\qquad = \begin{bmatrix} D_B & \\ & D_C \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \\ L_C^{-1} P_C^T & \end{bmatrix} \mathcal{F}_C \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \\ Q_C U_C^{-1} & \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \\ & \mathcal{F}_C \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{16}$$

2.2 Ошибки в дополнении по Шуру при отбрасывании

До сих пор рассматривали ошибку обращения $\mathcal{F}_K$. Для применения многоуровнего метода важной является точность вычисления дополнения по Шуру. При низкой точности вычислений система на нижних уровнях может стать сингулярной.

Допустим, после K шагов факторизации мы имеем неполное разложение $A = \tilde{\mathcal{L}}_K \tilde{\mathcal{D}}_K \tilde{\mathcal{U}}_K + \tilde{E}_K$ и полное разложение $A = \mathcal{L}_K \mathcal{D}_K \mathcal{U}_K$, где

$$\mathcal{L}_K = \begin{bmatrix} L_B & \\ L_E & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \mathcal{U}_K = \begin{bmatrix} U_B & U_F \\ & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \mathcal{D}_K = \begin{bmatrix} D_B & \\ & S \end{bmatrix}, \tag{17}$$

где L_B, U_B^T - нижние треугольные матрицы, D_B - диагональная матрица, а S - точное дополнение по Шуру.

Рассмотрим правый нижний блок для $\tilde{\mathcal{L}}_K \mathcal{L}_K \mathcal{D}_K \mathcal{U}_K \tilde{\mathcal{U}}_K^{-1} = \tilde{\mathcal{D}}_K + \mathcal{F}_K$:

$$\tilde{S} = S - \tilde{L}_E \tilde{L}_B^{-1} (L_B - \tilde{L}_B) D_B (U_B - \tilde{U}_B) \tilde{U}_B^{-1} \tilde{U}_F - \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathcal{F}_K \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{I} \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Получим, что ошибка в дополнении по Шуру зависит от:

- Ошибки в факторизации из-за отбрасывания в матричных коэффициентах $L_B - \tilde{L}_B$ и $U_B - \tilde{U}_B$;

- Ошибки обращения в члене $\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathcal{F}_K \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{I} \end{bmatrix}$, которая зависит от отбрасывания и версии вычисления дополнения по Шуру;

- Норм $\|L_E L_B^{-1}\|$ и $U_B^{-1} U_F$, которые зависят от норм обратных факторов $\|\tilde{L}_K^{-1}\| \leq \kappa, \|\tilde{U}_K^{-1}\| \leq \kappa$.

Обозначим $S^l = \{s_{ij}\}, \tilde{S}^l = \{\tilde{s}_{ij}^l, \tilde{M}^l = \{\tilde{m}_{ij}^l\}, \tilde{T}^l = \{\tilde{t}_{ij}^l\}$ - значения в точном и приближенных с помощью {S,M,T}-версия дополнениях по Шуру после $l = 1 \dots k$ шагов факторизации. Предположим, что диагональные элементы ограничены

$$\gamma \leq |\tilde{s}_{ll}^m|, |\tilde{m}_{ll}^m|, |\tilde{t}_{ll}^m| \leq \Gamma, \quad m = 0 \dots k, l = 1 \dots k, \tag{19}$$

что может быть достигнуто за счет масштабирования и переупорядочивания системы.

Теорема 2.2. *Предположим, что* (19) *выполнено, нормы обратных факторов ограничены* $\|\tilde{L}_K^{-1}\| \leq \kappa, \|\tilde{U}_K^{-1}\| \leq \kappa$, *и критерий отбрасывания* $\epsilon \leq \kappa^{-2}$. *Тогда*

- *S-версия: на каждом шаге* $m = 1 \dots k$ *отбрасываем* l_{im} *и* u_{mj}, $i, j > m$ *из* $\tilde{\mathcal{L}}_m$ *и* $\tilde{\mathcal{U}}_m$, *если* $|l_{im}|, |u_{mj}| \leq \epsilon\kappa^{-2}$, *тогда* $\exists \Theta_S = const > 0 : |s_{ij} - \tilde{s}_{ij}| \leq \Theta_S \epsilon$.

- *M-версия: на каждом шаге* $m = 1 \dots k$ *отбрасываем* l_{im} *и* u_{mj}, $i, j > m$ *из* $\tilde{\mathcal{L}}_m$ *и* $\tilde{\mathcal{U}}_m$, *если* $|l_{im}|, |u_{mj}| \leq \epsilon\kappa^{-2}$, *тогда* $\exists \Theta_M = const > 0 : |s_{ij} - \tilde{m}_{ij}| \leq \Theta_M (\kappa\epsilon)^2$.

- *T-версия: на каждом шаге* $m = 1 \dots k$ *отбрасываем* l_{im} *и* u_{mj}, $i, j > m$ *из* $\tilde{\mathcal{L}}_m$ *и* $\tilde{\mathcal{U}}_m$, *если* $|l_{im}|, |u_{mj}| \leq \epsilon$, *тогда* $\exists \Theta_T = const > 0 : |s_{ij} - \tilde{t}_{ij}| \leq \Theta_T (\kappa\epsilon)^2$.

Теорема требует выполнения условия (19), что обеспечивает отсутствие малых значений пивотов и больших значений в диагональной матрице $\tilde{D}_B$. Это в свою очередь означает, что $\tilde{D}_B$ не будет усиливать ошибки в (18). Это достигается за счет первоначального масштабирования и переупорядочивания системы и неявно в процессе факторизации за счет дальнейшего контроля за ограниченностью норм обратных факторов.

3 Вопросы

- Что такое дополнение по Шуру?

- Как работает многоуровневый метод неполной факторизации и его достоинства и недостатки по сравнению с алгебраическим многосеточным методом.

- В чем многоуровневый метод схож с алгебраическим многосеточным методом?

- Каким образом можно эффективно реализовать многоуровневый метод и учесть условия теорем об оценках?

- Что можно сказать о точности вычисления дополнения по Шуру?

Список литературы

[1] Matthias Bollhöfer, Yousef Saad “Multilevel Preconditioners Constructed From Inverse-Based ILUs”, SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 27, Iss. 5 (2006) DOI: 10.1137/040608374