Журнал обчислювальної та прикладної математики | **2013, №1(111)** | Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 517.9

ФАКТОРИЗАЦІЯ ОБЕРНЕНИХ МАТРИЦЬ РОЗРІДЖЕНИМИ МАТРИЦЯМИ

В. Ю. Гончаренко

Резюме. У роботі доведена можливість представлення матриці оберненої до розрідженої, у вигляді добутку розріджених матриць. Отримана точна оцінка довжини факторизації. Показано зв'язок факторизації матриць з побудовою прикладного програмного забезпечення розподілених обчислювальних систем з локальною взаємодією.

Вступ

Розглянемо просторово одновимірне рівняння тепломасопереносу зі слабкою нелінійністю

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u,x), x \in [0;1], t \in [0;\infty)$$

з початковими умовами

$$u(x,0) = u_0(x), u(0,t) = u_1(t), u(1,t) = u_2(t).$$

Припустимо, що $u_1(t)$, $u_2(t)$, та $f(u,x)$ задовольняють всім необхідним умовам.

Для дискретизації задачі скористаємось методом скінченних різниць ([1], с. 565).

Оберемо рівномірну сітку ω_h з кроком h, що має n внутрішніх вузлів по просторовій змінній, та рівномірну сітку ω_τ з кроком τ по часовій змінній. Використовуючи неявну схему, запишемо систему рівнянь відносно значень сіткової функції на $(k+1)$-му часовому шарі.

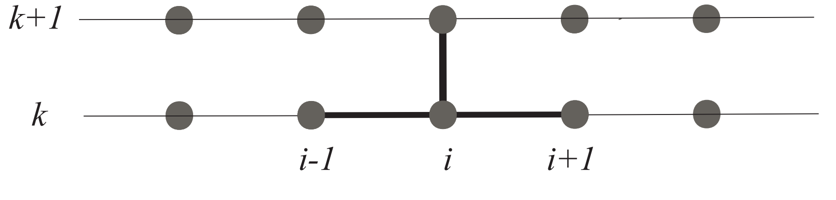

Рис. 1. Шаблон явної схеми.

$$\begin{cases} y_0^k = u_1((k+1)\tau), \\ \frac{y_i^{k+1}-y_i^k}{\tau} = \frac{1}{h^2}(y_{i+1}^k - 2y_i^k + y_{i-1}^k) + f(y_i^k), i = \overline{1,n}, \\ y_{n+1}^k = u_2((k+1)\tau), \end{cases}$$

де y_i^k — значення сіткової функції в просторовій точці (i,k). Після елементарних перетворень значення сіткової функції в i-й точці на $(k+1)$-му шарі можна знайти за формулою

$$y_i^{k+1} = \frac{\tau}{h^2}(y_{i+1}^k - (2 - \frac{h^2}{\tau})y_i^k + y_{i-1}^k) + f(y_i^k)\tau. \tag{1}$$

Отже, для переходу від часового шару з номером k до наступного часового шару з номером $(k+1)$ у i-й просторовій точці достатньо знати значення сіткової функції у точках $(i-1,k)$, (i,k), $(i+1,k)$, тобто у самій точці (i,k) та двох сусідніх $(i-1,k)$, $(i+1,k)$. В операторному вигляді перехід на наступний шар реалізується, як дія відображення

$$F(\bar{y}) = C\bar{y} + \bar{f}^k, \tag{2}$$

де C — трьохдіагональна матриця Якобі.

Це спостереження за часів появи мікропроцесорів наштовхнуло голландського інженера Я.Пакера (Y.Paker) на ідею створити спеціалізований обчислювач для розв'язання задач математичної фізики явними методами, яку він запатентував у 1977 році [2].

Рис. 2. Структура обчислювальної системи.

На рисунку 2 наведена структура такої обчислювальної системи. Квадратами позначаються процесори, стрілками — дуплексні канали зв'язку. Для переходу на $(k+1)$-й шар i-й процесор системи повинен по каналах зв'язку обмінятися інформацією про значення сіткової функції з сусідніми процесорами та обчислити значення сіткової функції y_i^{k+1} за формулою (1).

Отже, обчислювальна система може знаходитися в двох станах.

А. "Обмін" — коли i-та машина отримує інформацію про значення сіткової функції в машинах, що безпосередньо з нею зв'язані.

Б. "Обчислення" — обчислення значення сіткової функції в наступному часовому шарі.

За один цикл "обмін"-"обчислення" на обчислювальній системі, що зображена на рисунку 2, можна реалізувати дію відображення вигляду

$$F(\bar{x}) = \begin{cases} f_1(x_1; x_2), \\ \cdots, \\ f_i(x_{i-1}; x_i; x_{i+1}), \\ \cdots, \\ f_n(x_{n-1}; x_n), \end{cases} \tag{3}$$

Робота такої обчислювальної системи може бути зображена у вигляді суперпозиції відображень вигляду (3)

$$\bar{y} = F_k(\ldots(F_3(F_2(F_1(\bar{x})))))$$

або

$$\bar{y} = F_k \circ F_{k-1} \circ \ldots \circ F_1(\bar{x}).$$

Для обчислювальної системи, зображеної на рисунку 2 побудуємо орієнтований граф міжмашинних зв'язків G. Якщо дві машини зв'язані дуплексним каналом зв'язку, то їх сполучають двома різнонапрямленими дугами (від однієї до іншої і навпаки).

Машини мають локальну пам'ять. На графі це відображається наявністю петлі в кожній вершині (рис. 3).

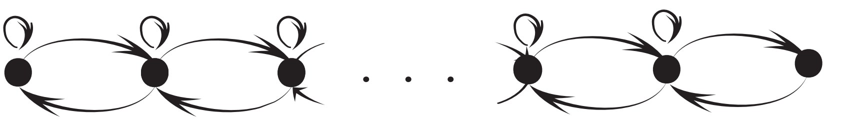

Рис. 3. Граф міжмишинних зв'язків.

Матриця суміжності графа, зображеного на рисунку 3, має вигляд

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & \cdots & & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & \cdots & & & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \cdots & & & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Зауважимо, що матриця C у відображенні (2) має нулі на тих самих місцях, що і матриця суміжності графа міжмашинних зв'язків в G. Стовпчики матриці суміжності вказують, від яких машин може отримати дані i-та машина, а отже, від яких змінних можуть бути обчислені координатні функції відображення (3).

Стійкість явних схем накладає обмеження на відношення $\frac{\tau}{h^2}$ ([1], с. 674). Відношення $\frac{\tau}{h^2}$ повинно бути достатньо малим. Зростання точності апроксимації по просторовій змінній приводить до квадратного збільшення часових шарів.

Тому застосуємо до вихідного рівняння неявну різницеву схему з шаблоном, що наведений на рисунку 4

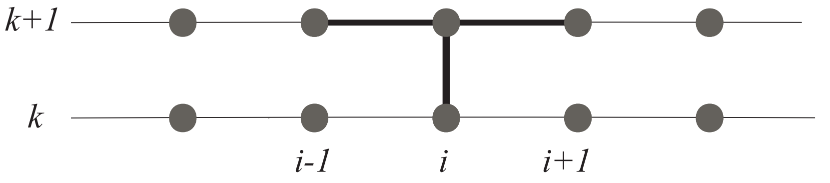

Рис. 4. Шаблон неявної схеми.

$$\begin{cases} y_0^{k+1} = u_1((k+1)\tau), \\ \frac{y_i^{k+1}-y_i^k}{\tau} = \frac{1}{h^2}(y_{i+1}^{k+1} - 2y_i^{k+1} + y_{i-1}^{k+1}) + f(y_i^k), \quad i = \overline{1,n}, \\ y_{n+1}^{k+1} = u_2((k+1)\tau), \end{cases}$$

Після елементарних перетворень отримаємо систему рівнянь

$$-y_{i-1}^{k+1} + (2 + \frac{h^2}{\tau})y_i^{k+1} - y_{i+1}^{k+1} = h^2 f(y_i^k) + \frac{1}{\tau}y_i^k, \quad i = \overline{1,n}.$$

Або в операторній формі

$$C_1 \bar{y}^{k+1} = \bar{f}^k.$$

Трьохдіагональна матриця C_1 є матрицею з діагональною перевагою, тому вона оборотна [4] (с. 52–53) і розв'язок системи можна представити у вигляді

$$\bar{y}^{k+1} = C_1^{-1}\bar{f}^k.$$

Але матриця C_1^{-1}, обернена до трьохдіагональної, буде заповненою. Вона не є відображенням вигляду (3), отже, виникає питання чи можна матрицю C_1^{-1} взагалі реалізувати у вигляді послідовності відображень (3).

Іншими словами, чи можна матрицю C_1^{-1} представити у вигляді добутку скінченної кількості трьохдіагональних матриць.

Узагальнена постановка задачі про факторизацію

Розглянемо багатопроцесорну обчислювальну систему MIMD структури з локальною взаємодією (за класифікацією Фліна [3]). Інтерпретуємо її як орієнтований граф G. Вершинами графа є універсальні машини, а дугами — однонапрямлені канали зв'язку. Якщо i-та машина може передати повідомлення машині з j-тим номером, то граф має дугу, яка починається в вершині з номером i та закінчується в вершині з номером j. Якщо машина має локальну пам'ять, то відповідна вершина має петлю. Назвемо граф G графом міжмашинних зв'язків обчислювальної системи.

Позначимо символом Θ_i множину номерів тих вершин графа, з яких в i-ту вершину веде дуга. Іншими словами, Θ_i — це множина номерів вершин зіркового графа заходу до вершини з номером i [5].

Нехай X_i — множина станів i-ї машини, $x_i \in X_i$, тоді вектор $\bar{x} = \{x_1; x_2; ...; x_n\}$ описує стан системи. Позначимо символом D множину можливих станів обчислювальної системи ($D \subseteq \otimes_{i=1}^{n} X_i$). Розглянемо в функціонуванні системи моменти зміни станів. Природньо припустити, що наступний стан машини з номером i є функцією від власного попереднього стану та стану машин, безпосередньо зв'язаних з нею, тобто машин з номерами з Θ_i. Тоді наступний стан системи буде вектором вигляду

$$\bar{y} = F(\bar{x}) = \{f_1(\bar{x}), ..., f_i(\bar{x}), ..., f_n(\bar{x})\}, \tag{4}$$

де відображення F переводить множину D в себе, а його координатні функції $f_i(\bar{x})$ залежать лише від тих координат вектора станів, номери яких належать Θ_i.

Означення. Відображення вигляду (4) називається *погодженим зі структурою графа G.*

Функціонування системи можна представити як послідовність станів

$$\bar{x}(j) = F_j(F_{j-1}(F_{j-2}(\ldots F_1(\bar{x}(0)))\ldots)),\ j \in N, \tag{5}$$

де всі F_i — відображення, погоджені зі структурою графа, $\bar{x}(i),\ldots,\bar{x}(j)$ — вектори початкового та наступного за ним стану системи. Відображення $\Phi = F_j \circ F_{j-1} \circ \ldots \circ F_0$, що переводить $\bar{x}(i)$ в $\bar{x}(j)$, необов'язково є погодженим зі структурою графа. Представлення відображення Φ у вигляді композицій відображень, що погоджені зі структурою графа, називається факторизацією. Доведення можливості факторизації відображення є предметом теорії розпаралелювання алгоритмів. Кількість відображень в факторизаційному ланцюзі називається його довжиною. Існує багато способів факторизації відображення. Найбільш ефективний той, що приводить до ланцюга найменшої довжини.

Визначення. *Найменшою довжиною факторизації відображення* $\Phi : D \to D$ відображеннями, погодженими зі структурою графа, називається найменша можлива довжина факторизаційного ланцюга

$$\min_{\sigma(F)}\{j|\, F = F_j \circ F_{j-1} \circ \ldots \circ F_0\}, \tag{6}$$

де F — погоджене зі структурою графа відображення, $\sigma(F)$ — множина всіх можливих способів факторизації відображення Φ.

Найменша довжина факторизації конкретного відображення

Φ характеризує найвищу продуктивність, якої може досягти обчислювальна система при реалізації дії $\bar{y} = \Phi\bar{x}$. Розвинути обчислення погоджених зі структурою графа відображень можна надаючи $D \subseteq \otimes_{i=1}^{n} X_i$ властивості конкретних математичних структур. Далі розглядається важливий для чисельного аналізу випадок, коли множина станів для кожної машини є множиною дійсних чисел, а множина станів обчислювальної системи — арифметичниим векторним простором R^n.

Нехай G — деякий орієнтований граф, що містить n вершин, з петлею в кожній вершині (дуги та петлі однократні), B_G — його матриця суміжності. Вкажемо вигляд матриць лінійних операторів, що діють на R^n і погоджені зі структурою графа G. Для цього в множині квадратних матриць M_N введемо відношення порядку. Назвемо матрицю $A = \{\, a_{i,j} | = \overline{1,n}\}$ передуючою матриці $B = \{\, b_{i,j} | = \overline{1,n}\}$, якщо з того, що $b_{i,j} = 0$ випливає, що $a_{i,j} = 0$ (позначається $A \prec B$). Це означає, що на тих місцях, де у більшої матриці B стоять нулі, у меншої матриці A також повинні бути нулі. Інші елементи меншої матриці можуть бути будь-якими.

Лінійний оператор C є узгодженим зі структурою графа G тоді і тільки тоді, коли його матриця $C \prec B_G^T$, де B_G^T — транспонована матриця суміжності графа G.

Критерій факторизації було вказано в роботі [6].

Теорема *(критерій факторизації). Будь-який невироджений лінійний оператор в R^nможе бути представлений у вигляді композиції операторів, погоджених зі структурою графа G, тоді і тільки тоді, коли граф G сильно зв'язний з петлею в кожній вершині.*

Довжина факторизації оцінювалась числом $2dn(n-1)+1$, де $d \geq 1$ — діаметр графа.

Теорема. *Для будь-якої невиродженої матриці $A \in M_n$ з ненульовими елементами на головній діагоналі існує такий факторизаційний ланцюг для її оберненої матриці $A^{-1} =!_m \times C_{m-1} \times \cdots \times C_1$, що всі $C_k \prec A$ та її довжина менша n.*

*Доведення.*Нехай A — квадратна матриця розміру $n \times n$. Розглянемо її характеристичний многочлен

$$P_n(\lambda) = \det(\lambda E - A) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + \ldots + +a_{n-1}\lambda + a_n.$$

Якщо A — невироджена матриця, то вільний член характеристичного многочлена $a_n = P_n(0) = \det(-A) \neq 0$ відмінний від нуля. По теоремі Гамільтона-Келлі характеристичний многочлен $P_n(\lambda)$ є тим, що анулює матрицю A, тобто

$$A^n + a_1A^{n-1} + a_2A^{n-2} + ... + a_{n-1}A + a_nE = 0.$$

Представимо останній доданок цієї матричної рівності у вигляді
$a_nE = a_nA^{-1}A$, тоді

$$A^n + a_1A^{n-1} + a_2A^{n-2} + ... + a_{n-1}A = -a_nA^{-1}A.$$

Домножимо справа на A^{-1} і розділимо на $-a_n$, отримаємо

$$A^{-1} = -\frac{1}{a_n}(A^{n-1} + a_1A^{n-2} + ... + a_{n-1}E).$$

Таким чином, підстановка матриці A в многочлен

$$B_{n-1}(\lambda) := \frac{1}{\lambda}(P_n(\lambda) - a_n)$$

дає з точністю до знаку матрицю, приєднану (взаємну) по відношенню до A. Доведення випливає з того, що $A + \lambda E \prec A$, та можливості розкладу $B_{n-1}(\lambda)$ на множники.

Результат є точним у тому сенсі, що існують такі матриці $A \in M_n$, для яких довжина факторизаційного ланцюга дорівнює $n-1$ (наприклад, матриця C_1).

Висновок

Нехай G — граф міжмашинних зв'язків обчислювальної системи. Матриця A — оборотна. Тоді на такій обчислювальній системі можливий розв'язок СЛАР $A\bar{x} = \bar{b}$ за не більш ніж $(n-1)$ циклів "обмін-обчислення".

Література

1. Тихонов А. Н. Уравнения математической физики. / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский — М: Наука, 1972. — С. 556–557.
2. Paker Y. Application of microprocessor networks for the oclution of diffusion equotion / Y. Paker — Math. and Comput. In Simul. — 1977. — XIX, № 1 — P. 23–27.
3. Flynn M. Some computer organizations an their effectiveness / M. Flynn — IEEE Trans. Comput. — 1972. — P. 21.
4. Ортега Дж. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными / Дж. Ортега, В. Рейнболт — М: Мир, 1975. — С. 52–53.
5. Оре О. Теория графов / О. Оре — М: Наука, 1989. — С. 23.
6. Гончаренко Ю.В. О некоторых свойствах операторов, согласованных со структурой графа / Ю.В. Гончаренко — К: Вища школа, Исследование операций и АСУ, Выпуск 23, 1984. — С. 73–81.
7. Гончаренко В.Ю. Оценка длины факторизации квадратных матриц разреженными матрицами / В.Ю. Гончаренко // Воронежская международная научная конференция „Современные проблемы прикладной математики, теории управления и математического моделирования“, 12–17 сентября 2011: материалы/ Воронеж, Россия — 2011. — Т. 1. — С. 71–72.

Факультет кібернетики, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, Київ, 01601, Україна.

Надійшла 05.07.2012