

Преобуславяне. Блочна циркулантна факторизация

Иван Лирков

27 ноември 2003 г.

1 Терминология

Дефиниция 1 Една квадратна матрица T се нарича Тъоплицова ако $T_{kj} = t_{j-k}$, т.е. елементите по диагоналите на T са равни.

Дефиниция 2 Една $n \times n$ матрица C се нарича циркулантна, ако е Тъоплицова и $c_{-k} = c_{n-k}$ за $k = 1, 2, \dots, n-1$.

$$T = \begin{pmatrix} t_0 & t_1 & t_2 & \cdots & t_{n-1} \\ t_{-1} & t_0 & t_1 & \cdots & t_{n-2} \\ t_{-2} & t_{-1} & t_0 & \cdots & t_{n-3} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ t_{1-n} & t_{2-n} & t_{3-n} & \cdots & t_0 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{n-1} \\ c_{n-1} & c_0 & c_1 & \cdots & c_{n-2} \\ c_{n-2} & c_{n-1} & c_0 & \cdots & c_{n-3} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_1 & c_2 & c_3 & \cdots & c_0 \end{pmatrix}$$

За циркулантната матрица е изпълнено равенството

$$C_{kj} = c_{(j-k) \bmod n}.$$

Тази дефиниция може да се обобщи за блочно-циркулантна матрица, като заместим всеки елемент C_{kj} с квадратна матрица.

Фундаментално свойство, определящо ефективността на много приложения е, че всяка циркулантна матрица може да се запише във вида:

$$C = F^* \Lambda F, \quad (1)$$

където Λ е диагонална матрица, съдържаща собствените стойности на C , а F е матрицата на Фурие

$$F = \{f_{jk}\}_{0 \leq j, k \leq n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \left\{ e^{2\pi \frac{jk}{n} i} \right\}_{0 \leq j, k \leq n-1}.$$

Тук с i е означена имагинерната единица. Това свойство е доказано в следната Лема.

Лема 1 Собствените стойности на циркулантна матрица C с първи ред $(c_0, c_1, \dots, c_{n-1})$ са

$$\lambda_k(C) = \sum_{l=0}^{n-1} c_l e^{2\pi \frac{lk}{n} i},$$

а собствените вектори на всяка циркулантна матрица са

$$v_k = (v_{k,0}, v_{k,1}, \dots, v_{k,n-1})^T,$$

където $v_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{2\pi \frac{lk}{n} i}$.

2 Обща формулировка

Разглеждаме следната двумерна елиптична задача:

$$\begin{aligned} -(a(x, y)u_x)_x - (b(x, y)u_y)_y &= f(x, y), & \forall (x, y) \in \Omega, \\ 0 < c_{\min} \leq a(x, y), b(x, y) &\leq c_{\max}, \\ u(x, y) = 0, & \quad \forall (x, y) \in \Gamma = \partial\Omega, \end{aligned} \quad (2)$$

като $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ е покрита с равномерна квадратна мрежа ω_h със стъпка $h = 1/(n+1)$ за дадено цяло число $n \geq 1$. Задачата (2) е апроксимирана по метода на крайните разлики върху стандартен пет-точков шаблон (методът на крайните елементи за линейни триъгълни елементи води до подобен резултат). Тази дискретизация води до система линейни алгебрични уравнения

$$A\mathbf{u} = \mathbf{f}. \quad (3)$$

Ако точките от мрежата са подредени по линиите на мрежата, успоредни на ординатната ос, матрицата A има блочно-тридиагонална структура (с блокове, съответстващи на неизвестните от дадена линия от мрежата) и може да се запише в следната форма

$$A = \text{tridiag}(-A_{i,i-1}, A_{i,i}, -A_{i,i+1}) \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

където

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= \text{tridiag}(-a_{j,j-1}, a_{j,j}, -a_{j,j+1}), & j = (i-1)n+1, \dots, in, \\ & & i = 1, 2, \dots, n, \\ A_{i,i+1} &= \text{diag}(a_{j,j+n}), & j = (i-1)n+1, \dots, in, \\ & & i = 1, \dots, n-1, \\ A_{i,i-1} &= \text{diag}(a_{j,j-n}), & j = (i-1)n+1, \dots, in, \\ & & i = 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Коефициентите $a_{i,j}$ са положителни, като $a_{j,j} \geq a_{j,j-1} + a_{j,j+1} + a_{j,j+n} + a_{j,j-n}$, т.е. матрицата A удовлетворява принципа на максимумата.

Като използваме стандартната процедура за блочна LU факторизация, можем първо да разделим матрицата

$$A = D - L - U$$

съответно на нейните блочно-диагонална и строго блочно-триъгълни части. Тогава *точната* блочна факторизация може да се запише във вида

$$A = (X - L)(I - X^{-1}U),$$

където блоковете на $X = \text{diag}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ трябва да бъдат определени. В сила е равенството

$$A = D - L - U = X - L - U + LX^{-1}U.$$

Следователно

$$X = D - LX^{-1}U,$$

което покомпонентно се записва във вида

$$X_1 = A_{1,1} \tag{4}$$

$$X_i = A_{i,i} - A_{i,i-1}X_{i-1}^{-1}A_{i-1,i}, \quad i = 2, \dots, n. \tag{5}$$

Тази факторизация може да се използва за решаване на (3). За това е необходимо решаването на линейни системи, относно блоковете X_i . Трябва да се отбележи, че X_i са пълни матрици. Получената (директна) Гаусова елиминация за разглежданата задача има изчислителна сложност с асимптотика $\mathcal{O}(n^4)$. При задачи с голяма размерност тази сложност е неприемливо голяма. Основната идея на блочната непълна (ILU) факторизация е да се апроксимират X_i (или X_i^{-1}) с разредени (лентови) матрици. Идеята, използвана при циркулантна блочна факторизация, е първо да променим изходната матрица A по такъв начин, че получените блокове при точната факторизация на новата матрица (на мястото на X_i) да са циркулантни.

Общата форма на преобусловителя M , получен чрез блочната циркулантна факторизация, за матрицата A е

$$M = \text{tridiag}(-C_{i,i-1}, C_{i,i}, -C_{i,i+1}) \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

където $C_{i,j} = \text{Circulant}(A_{i,j})$ е циркулантна апроксимация на съответния блок $A_{i,j}$. След това използваме точна блочна LU факторизация за преобусловителя M . Забележете, че рекурсията (5), изпълнена за M , е затворена в класа на циркулантните матрици. Съответните блокове X_i са циркулантни и следователно решаването на системи с преобусловителя M може да се изпълни ефективно, използвайки бързо преобразование на Фурие (виж представянето (1) за блоковете X_i).

Съществуват два подхода за циркулантно усредняване при конструиране на преобусловители, основани на циркулантна факторизация. Един от подходите при определянето на циркулантната апроксимация може да се интерпретира като едновременно

усредняване на коефициентите на матрицата и смяна на граничните условия на Дирихле с периодични гранични условия. Въвеждаме следните означения

$$\begin{aligned}\bar{a}_{i,i\pm 1} &= \frac{1}{n} \sum_{j=(i-1)n+1}^{in} a_{j,j\pm n} \\ \bar{a}_{i,i,-1} &= \frac{1}{n} \sum_{j=(i-1)n+2}^{in} a_{j,j-1} + \frac{d_i}{n} \\ \bar{a}_{i,i,1} &= \frac{1}{n} \sum_{j=(i-1)n+1}^{in-1} a_{j,j+1} + \frac{d_i}{n} \\ \bar{a}_{i,i,0} &= \frac{1}{n} \sum_{j=(i-1)n+1}^{in} a_{j,j},\end{aligned}$$

като (ако матрицата A е получена по метода на крайните разлики с петточков шаблон)

$$d_i = \min(b(ih, \frac{h}{2}), b(ih, 1 - \frac{h}{2})).$$

Циркулантните блокове се определят от формулите

$$\begin{aligned}C_{i,i} &= (\bar{a}_{i,i,0}, -\bar{a}_{i,i,1}, 0, \dots, 0, -\bar{a}_{i,i,-1}). \\ C_{i,i\pm 1} &= (\bar{a}_{i,i\pm 1}, 0, \dots, 0) = \bar{a}_{i,i\pm 1}I.\end{aligned}$$

Тогава блочно-тридиагоналният преобусловител M е дефиниран чрез

$$M = \text{tridiag}(-C_{i,i-1}, C_{i,i}, -C_{i,i+1}).$$

Лема 2 Дефинираният преобусловител M е симетричен и положително определен.

Теорема 1 Преобулавящата матрица M_0 , определена от горния алгоритъм при уравнение на Лаплас ($a(x, y) = b(x, y) = 1$) има относително число на обусловеност

$$\kappa(M_0^{-1}A_0) < \sqrt{2}(n+2). \quad (6)$$

3 Изчислителна сложност на алгоритъма

За да получим M^{-1} , ще запишем циркулантните блокове на преобусловителя във вида

$$\begin{aligned}C_{i,j} &= F^* \Lambda_{i,j} F \\ X_i &= F^* D_i F\end{aligned}$$

откъдето получаваме

$$\begin{aligned}D_1^{-1} &= \Lambda_{1,1} \\ D_i^{-1} &= \Lambda_{i,i} - \Lambda_{i,i-1} D_{i-1} \Lambda_{i-1,i}.\end{aligned}$$

Ако означим с

$$\Lambda = \text{tridiag}(\Lambda_{i,i-1}, \Lambda_{i,i}, \Lambda_{i,i+1}),$$

получаваме

$$M = (I \otimes F^*)\Lambda(I \otimes F)$$

и съответно

$$M\mathbf{w} = \mathbf{u} \iff (I \otimes F^*)\Lambda(I \otimes F)\mathbf{w} = \mathbf{u}$$

Можем да разделим решаването на система с преобусловителя на три етапа

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{u}} &= (I \otimes F)\mathbf{u} \\ \Lambda\bar{\mathbf{w}} &= \bar{\mathbf{u}} \\ \mathbf{w} &= (I \otimes F^*)\bar{\mathbf{w}}\end{aligned}$$

Първият и третият етап могат да се изпълнят чрез блочно бързо преобразование на Фурие, а вторият етап съдържа решаването на две рекурентни уравнения

$$\left| \begin{array}{l} \mathbf{v}_1 = D_1\mathbf{u}_1 \\ \mathbf{v}_i = D_i(\mathbf{u}_i - \Lambda_{i,i-1}\mathbf{v}_{i-1}) \\ i = 2, 3, \dots, n \end{array} \right| \quad \left| \begin{array}{l} \mathbf{w}_n = \mathbf{v}_n \\ \mathbf{w}_i = \mathbf{v}_i - D_i\Lambda_{i,i+1}\mathbf{w}_{i+1} \\ i = n-1, n-2, \dots, 1 \end{array} \right| \quad (7)$$

Разбира се, за да можем да използваме бързо преобразование на Фурие, ще предположиме, че n е точна степен на двойката. Блочното бързо преобразование на Фурие може лесно да се паралелизира, а (7) съдържа n независими системи, които могат да се пресмятат паралелно.

Общото време за обръщане на преобусловителя е

$$\begin{aligned}T_{inversion} &= 2T_{FFT} + 2T_{recurrence} \\ T_{FFT} &= 10n^2 \log n \\ T_{recurrence} &= (3n - 2)n\end{aligned}$$

Следователно можем да получим оценка за общото време за изпълнение на метода на спрегнатия градиент с разгледаните преобусловители.

Теорема 2 *Общата изчислителна сложност на метода на спрегнатия градиент с преобусловител, получен чрез блочна циркулантна факторизация, има вида*

$$T_{PCG} \leq 9n^2 + (20n^2 \log n + 25n^2) \left[\frac{1}{2} \sqrt{\kappa(M^{-1}A)} \ln \frac{2}{\varepsilon} \right].$$