НАДЕЖНОЕ ТРЕУГОЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННЫХ МАТРИЦ В АРИФМЕТИКЕ ПОНИЖЕННОЙ ТОЧНОСТИ С ПРИМЕНЕНИЕМ К ДРУГИМ СТАНДАРТНЫМ ЗАДАЧАМ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ

И.Е. Капорин[1]

[1]*Вычислительный центр им. А.А.Дородницына РАН, Москва*

Для произвольной симметричной положительно определенной матрицы рассматривается задача вычисления ее треугольного разложения в смешанной арифметике (например, с использованием двойной и одинарной точности с преобладанием последней). На основе разработанного алгоритма могут быть построены эффективные и надежные алгоритмы решения систем линейных алгебраических уравнений и спектральных задач с разреженными матрицами.

Известно [1-3], что арифметика пониженной точности обладает гораздо более высоким быстродействием на некоторых современных вычислительных системах (напр., FPGA, STI Cell BE, GP-GPU) по сравнению с арифметикой стандартной (двойной) точности. В то же время, задачи большого размера, возникающие при дискретном моделировании сложных процессов, могут обладать довольно плохой обусловленностью. На первый взгляд, последнее обстоятельство исключает применение вычислений пониженной точности. Тем не менее, к настоящему времени известны алгоритмы решения стандартных алгебраических задач в смешанной арифметике (с преобладанием операций в арифметике пониженной точности). К ним относится, например, метод итерационного уточнения [1-3] для решения одной из наиболее часто встречающихся трудоемких стандартных вычислительных задач - систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $Ax=b$ с невырожденной $n\times n$-матрицей A большого размера n.

Рассматриваемая нами проблема ставится следующим образом. Пусть задана плохо обусловленная симметричная положительно определенная матрица A, доступная нам в арифметике повышенной (например, двойной) точности, и требуется определить ее приближенное треугольное разложение

$$A=U^{\mathbf{T}}U+E,$$

где U - верхняя треугольная матрица с ненулевой диагональю, представленная в пониженной (например, однократной) точности, а E - матрица погрешности. Заметим, что элементы последней матрицы, вообще говоря, могут на много порядков превосходить допустимые возмущения исходной матрицы A. Тем не менее, при этом требуется, чтобы матрица $U^{-T}AU^{-1}$ была в достаточной мере близка к единичной матрице. Понятно, что как попытка прямолинейной реализации метода Холесского в однократной точности, так и округление результата аналогичных вычислений, выполненных в двукратной точности, в случае плохо обусловленной матрицы A могут приводить к совершенно неприемлемым результатам. Заметим, что указанное обстоятельство является слабым местом методик итерационного уточнения типа описанных в [1-3]. Решение поставленной задачи дает метод «треугольного разложения второго порядка точности» [4,5], основанный на подходящем структурировании матрицы погрешности:

$$A=U^{\mathbf{T}}U+U^{\mathbf{T}}R+R^{\mathbf{T}}U,$$

где R - верхняя треугольная матрица (на этот раз - с нулевой диагональю), элементы которой равны погрешностям перевода соответствующих чисел из двукратной точности в однократную в процессе вычислений. (При этом диагональные элементы матрицы U приходится все же хранить в двойной точности.) Указанная формула, с одной стороны, дает рекуррентные формулы

$$k = 1,2,\dots,n: \quad u_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1}(u_{ik}^2 + 2u_{ik}r_{ik})} ,$$
$$\hat{u}_{kj} = (a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1}(u_{ik}u_{ij} + u_{ik}r_{ij} + r_{ik}u_{ij}))/u_{kk} ,$$
$$u_{kj} = \mathrm{APPROX}(\hat{u}_{kj}) , \quad r_{kj} = \hat{u}_{kj} - u_{kj} , \quad j > k ,$$

для реализации алгоритма, где u_{kk} , $\hat{u}_{kj}$ и a_{kj} - числа в повышенной точности, а u_{kj} и r_{kj} при $j > k$ - числа пониженной точности. (При этом не накладывается никаких особых требований на оператор APPROX перехода в пониженную точность.) С другой стороны, та же формула означает, что матрица U появляется в результате округления внедиагональных элементов множителя Холесского, вычисленного для «регуляризованной» матрицы

$$A + R^{\mathbf{T}}R = (U + R)^{\mathbf{T}}(U + R),$$

что указывает на корректность алгоритма. Строгие теоретические оценки для качества получаемого приближения $U^{-T}AU^{-1}$ к единичной матрице и некоторые полезные обобщения легко следуют из результатов [4,5]. Например, можно показать, что спектральное число обусловленности $\mathrm{cond}(U^{-T}AU^{-1})$ ограничено возрастающей функцией от величины $\tau^2\mathrm{cond}(A)$, где τ - верхняя граница относительной погрешности пониженной точности (что объясняет название «приближенное разложение 2-го порядка», в отличие от тривиальных алгоритмов, где в аналогичной оценке фигурирует величина $\tau\,\mathrm{cond}(A)$). Описанный алгоритм естественным образом обобщается на случай положительно определенных несимметричных матриц, а также на задачу вычисления приближенных разреженных треугольных факторизаций. Последние, в свою очередь, могут быть использованы для построения предобусловленных итерационных алгоритмов в смешанной арифметике [1-3]. Приводятся примеры расчетов для плохо обусловленных разреженных матриц из коллекции университета Флориды [6].

Работа поддерживалась целевыми программами П-15 и П-18 президиума РАН, грантом РФФИ 11-01-00786 и грантом НШ-5264.2012.1.

Литература

1. Buttari, A., Dongarra, J., Kurzak, J., Luszczek, P., Tomov, S. Using mixed precision for sparse matrix computations to enhance the performance while achieving 64-bit accuracy //ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS). – 2008. – Т. 34. – №. 4. – С. 17.
2. Kurzak J., Dongarra J. Implementation of mixed precision in solving systems of linear equations on the CELL processor //Concurrency and Computation: Practice and Experience. – 2007. – Т. 19. – №. 10. – С. 1371-1385.
3. Baboulin M., Buttari, A., Dongarra, J. et al. Accelerating scientific computations with mixed precision algorithms //Computer Physics Communications. – 2009. – Т. 180. – №. 12. – С. 2526-2533.
4. Kaporin I.E. High quality preconditioning of a general symmetric positive matrix based on its $U^TU + U^TR + R^TU$-decomposition // Numer. Linear Algebra Appls. -1998.-T.5.-C.484-509.
5. Kaporin I.E., Using the Modified 2nd Order Incomplete Cholesky Decomposition as the Conjugate Gradient Preconditioning. Numerical Linear Algebra with Applications. -2002.-T.9.-C.401-408.
6. Davis T. A., Hu Y. The University of Florida sparse matrix collection //ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS). – 2011.– T.38.– №.1.– C.1-28.