Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 6, n. 2, 2018.

Trabalho apresentado no XXXVIII CNMAC, Campinas - SP, 2018.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Inversa Aproximada por Blocos e Matrizes $\mathcal{M}$

Moisés Ceni de Almeida[1]
PPG-EM, UERJ, Departamento de Matemática e Desenho, CAp, UERJ, Rio de Janeiro, RJ
Luiz Mariano Carvalho[2]
Departamento de Matemática Aplicada, IME, UERJ, Rio de Janeiro, RJ
Michael Ferreira de Souza[3]
Departamento de Estatística e Matemática Aplicada, UFC, Ceará, CE

Resumo. Precondicionadores baseados em aproximações esparsas da inversa são particularmente convenientes em ambientes massivamente paralelos, pois sua aplicação se resme à multiplicação de matrix-vetor. Um destes precondicionadores é o BAINV que constrói uma aproximação por blocos da inversa [3]. Nos algoritmos de aproximação, uma das estratégias de obtenção de esparsidade é a exclusão/descarte de determinadas entradas da matriz do precondicionador. No presente trabalho, demonstramos que o BAINV com descarte é bem definido e gera precondicionadores não-singulares quando aplicado à classe de matrizes $\mathcal{M}$ estudadas sistematicamente por Ostrowski e Plemmons [5, 8].

Palavras-chave. matrizes $\mathcal{M}$, BAINV, descartes, robustez, precondicionadores.

1 Introdução

A grande vantagem da utilização de um precondicionador que aproxime a inversa de uma matriz é sua aplicação poder ser feita através da multiplicação matriz-vetor. Este é um núcleo de álgebra linear que é massivamente paralelo e adequado às diversas arquiteturas computacionais contemporâneas, sejam com memória distribuída ou compartilhada, multicores ou GPU's, ou até mesmo arquiteturas híbridas que possuam todas essas alternativas trabalhando em conjunto. As fatorações incompletas, muito utilizadas ainda hoje como precondicionadores, [7, 9], sofrem por não ter as fases de construção e aplicação paralelas, apesar de já haver algumas propostas nesse sentido, ver [4, 6, 11].

Benzi e coautores em [2] propuseram um algoritmo denominado BAINV para sistemas lineares $Ax = b$ esparsos com matrizes em blocos da classe $\mathcal{M}$ (ver definição na Seção 3). Em [3], provamos que o algoritmo BAINV constrói uma fatoração $ZDZ = A^{-1}$ da inversa de A. No presente trabalho, demonstramos rigorosamente que o algoritmo BAINV com descarte é bem-definido e constrói uma aproximação da inversa de matrizes $\mathcal{M}$.

Na seção 2, apresentamos o AINV em bloco. Na 3, discutimos algumas propriedades das matrizes $\mathcal{M}$ e provamos o principal resultado do texto. Conclusões e trabalhos futuros são descritos na Seção 4.

[1]moisesceni@gmail.com
[2]luizmc@ime.uerj.br
[3]souza.michael@gmail.com

2 Algoritmo BAINV

Sejam A_i e Z_i as i-ésimas colunas em bloco[4] de A e Z, respectivamente. O AINV em blocos (BAINV) é descrito pelo Algoritmo 1. Os índices altos referem-se à iteração em curso.

Algorithm 1 BAINV

```
1  Z = I
2  for i =  1 : (k-1),
3     P_i = (A_i)^T ^Z_i^(i-1)
4     for j = i+1 :  k,
5         M_j^(i-1) =  (A_i)^T Z_j^(i-1)
6     for j = i+1 : k,
7         Z_j^(i-1) = Z_j^(i-2)-Z_i^(i-1) (P_i^(i-1))^(-1)M_j^(i-1)
8  P_k = (A_k)^T Z_k
9  D = Diag(P_1, P_2,...,P_k)
```

Os detalhes desse algoritmo foram discutidos em [3], aqui vamos fazer comentários específicos da implementação em questão. O BAINV calcula a inversa exata da matriz A e, portanto, pode ser inviável caso a matriz original seja esparsa e a sua inversa densa, fato corriqueiro em problemas oriundos de discretização de operadores diferenciais. Nesses casos, o cálculo exato para matrizes grandes é desaconselhável, sendo necessário o descarte de algumas entradas para manutenção da esparsidade. Na prática, o descarte é feito na linha 7 do Algoritmo 1. Para matrizes com estruturas de bloco, a matriz D também pode ter pivôs densos. Portanto, devemos implementar, nas linhas 3 e 8 do Algoritmo 1, descartes para esses blocos, o que não ocorre no caso escalar. Nessa situação, o descarte é feito fora da diagonal principal dos pivôs P_i, $i = 1, \dots, k$. Há diversas possibilidades, mas o tipo mais simples de descarte é por tolerância, quando descarta-se uma entrada se sua magnitude é menor que um parâmetro pré-estabelecido.

3 As Matrizes $\mathcal{M}$ e o BAINV

Precisamos de algumas definições iniciais.

Definição 3.1. *Uma matriz A, de ordem n, é uma matriz $\mathcal{Z}$ (ou, simplesmente, $A \in \mathcal{Z}$) se $a_{ij} \leq 0$ para $i \neq j$.*

Definição 3.2. *Seja $\rho(B)$ o espectro[5] de B. A matriz $A \in \mathcal{Z}$, de ordem n, pertence à classe das matrizes $\mathcal{M}$ (ou, simplesmente, $A \in \mathcal{M}$), se $A = sI - B$, onde $B = (b_{ij})$, com $b_{ij} \geq 0$, $1 \leq i, j \leq n$, e $s \geq \rho(B)$.*

Por essas definições, $\mathcal{M} \subset \mathcal{Z}$.

[4] Denominamos de **coluna em bloco** uma matriz $m \times n$ com $m > n$. Nesse trabalho $n > 1$.

[5] $\rho(B) = \text{máx}\{|\lambda|; \lambda \in \Lambda(B)\}$, onde $\Lambda(B)$ é o conjunto dos autovalores de B.

DOI: 10.5540/03.2018.006.02.0284

Lema 3.1 (Caracterização N39 em [8])**.** *Seja A, de ordem n, uma matriz $\mathcal{Z}$. Então A é uma matriz $\mathcal{M}$ não singular se, e somente se, sua diagonal é positiva e existe uma matriz diagonal positiva tal que AD é estritamente diagonal dominante, ou seja,*

$$a_{ii}d_i \geq \sum_{j\neq i} |a_{ij}|d_j,$$

para $i = 1, \ldots, n$.

Lema 3.2. *Seja A uma matriz SP[6] e P_r, $1 \leq r \leq k$, um pivô produzido pelo Algoritmo 1. Então, P_r é uma matriz SP.*

Demonstração. De $A^T = A$, segue que $D^T = (Z^T AZ)^T = Z^T AZ = D$. Seja $x \in \mathbb{R}^m \setminus \{0\}$. Pelo Algoritmo 1, $P_r = Z_r^T AZ_r$ e

$$x^T P_r x = x^T Z_r^T AZ_r x.$$

Note que, como Z é não singular, $Z_r \in \mathbb{R}^{n\times m}$, com $n > m$, tem posto completo. Portanto, $u = Z_r x \neq 0$ e

$$x^T P_r x = u^T Au > 0,$$

já que A é SP. □

Lema 3.3. *Seja $A \in \mathcal{M}$ e SP. Sejam P_r, $1 \leq r \leq k$, os pivôs produzidos pelo Algoritmo 1. Se $Z \geq 0$, então $P_r \in \mathcal{M}$.*

Demonstração. Primeiramente, provaremos que $P_r \in \mathcal{Z}$, para $1 \leq r \leq k$. De fato, pelo Algoritmo 1, para $1 \leq r \leq k$

$$P_r = \sum_{\ell=1}^{r-1} A_{r\ell}Z_{\ell r} + A_{rr}.$$

Como $A \in \mathcal{M}$, $A_{rr} \in \mathcal{Z}$ e $A_{rl} \leq 0$, para $r \neq l$. Assim, uma vez que $Z \geq 0$, temos que P_r é uma soma de $\mathcal{Z}$ matrizes.

Agora, pela Proposição 3.2, P_r é SP, logo, pelo critério de Sylvester [10], P_r possui todos os menores principais positivos. Usando a Caracterização D_{11} apresentada em [8], concluímos que $P_r \in \mathcal{M}$ e é não singular. □

Lema 3.4. *Se B e C são matrizes $n \times p$ tais que $B \leq C$ e A é matriz positiva $q \times n$ então $AB \leq AC$.*

Demonstração. Fixe as colunas B_j e C_j de B e C respectivamente. De $B \leq C$ segue que $B_j \leq C_j$. Fixe ainda a linha A_i de A. Como A é positivo segue que $A_iB_j \leq A_iC_j$ e, portanto, $AB \leq AC$. □

Lema 3.5. *Sejam A e $B \in \mathcal{M}$, de ordem n e não singulares, com $A \leq B$. Então, $B^{-1} \leq A^{-1}$.*

[6]Matriz SP é simétrica, $A = A^T$, e positiva, $x^T Ax > 0$, caso $x > 0$.

Demonstração. De $A \leq B$ temos, pelo Lema 3.4, $I_n = A^{-1}A \leq A^{-1}B$, pois $A^{-1} \geq 0$ pela Caracterização F_{15}, [8]. Agora, utilizando o fato de que $B^{-1} \geq 0$ teremos, multiplicando pela direita, que $B^{-1} \leq A^{-1}$. □

Reunimos as condições técnicas para enunciar e demonstrar o principal resultado deste trabalho.

Teorema 3.1. *Seja $A \in \mathcal{M}$ matriz em blocos, SP e de ordem n, com $n = k * m$, onde m é a ordem dos blocos. Sejam os pivôs em bloco P_i, de ordem m, e a matriz em blocos Z, de ordem n, produzidos pelo Algoritmo 1, BAINV. Suponha que tenha sido estabelecido um critério de descarte para a região estritamente superior de Z por tolerância (escalar ou da norma do bloco) ou por posição previamente escolhida e também um descarte por tolerância (escalar) fora da diagonal ou por posição em P_i, produzindo os pivôs em bloco $\widetilde{P}_i$. Então,*

$$\det(\widetilde{P}_i) \neq 0.$$

Demonstração. Provaremos por indução que

$$H_r := \begin{cases} P_r \leq \widetilde{P}_r, & \\ \widetilde{P}_r \in \mathcal{M}, & \text{com } \det(\widetilde{P}_r) \neq 0, \\ M_j^{(r-1)} \leq \widetilde{M}_j^{(r-1)} \leq 0, & j > r, \\ 0 \leq \widetilde{Z}_j^r \leq Z_j^r, & j > r, \end{cases}$$

para $1 \leq r \leq k$.

Para $r = 1$, $P_1 = A_{11} \leq= \widetilde{P}_1$ (nesse ponto já ocorreu descarte, mas apenas fora da diagonal do pivô, pois Z_1 é a primeira coluna bloco da identidade).

Note que $\widetilde{P}_1$ tem diagonal positiva (pois é maior que uma matriz $\mathcal{M}$) e

$$(\widetilde{P}_1)_{ij} := \begin{cases} (P_1)_{ij} \\ 0 \end{cases}$$

Assim, $\widetilde{P}_1$ é matriz $\mathcal{Z}$.

Agora, como $P_1 \in \mathcal{M}$ tem-se que existe matriz diagonal $D, m \times m$ tal que $(P_1)_{ii}di > \sum_{j\neq i} |(P_1)_{ij}|dj$ para $i = 1, \ldots, m$. Portanto, como $(\widetilde{P}_1)_{ii} \geq (P_1)_{ii}$ e $|(P_1)_{ij}| \geq |(\widetilde{P}_1)_{ij}|$, temos que $(\widetilde{P}_1)_{ii}di > \sum_{j\neq i} |(\widetilde{P}_1)_{ij}|dj$, para $i = 1, \ldots, m$. Portanto, pelo Lema 3.1, $\widetilde{P}_1$ é uma matriz $\mathcal{M}$ não singular.

Como $A \in \mathcal{M}$ e não sendo realizado descarte na matriz inicial $Z = I$, então,

$$A_{1j} = M_j^{(0)} \leq \widetilde{M}_j^{(0)} \leq 0, \text{ para } 2 \leq j \leq k.$$

Como, para $1 \leq j \leq k$, $0 \leq \widetilde{Z}_j^{(0)} = Z_j^{(0)} = E_j$ e pela Caracterização F_{15}, [8], e pelo Lema 3.5, $0 \leq \widetilde{P}_1^{-1} \leq P_1^{-1}$ e $0 \leq -\widetilde{M}_j^{(0)} \leq -M_j^{(0)}$, então

$$0 \leq \widetilde{Z}_j^{(1)} = \widetilde{Z}_j^{(0)} - \widetilde{Z}_1 \widetilde{P}_1^{-1} \widetilde{M}_j^{(0)} \leq Z_j^{(0)} - Z_1 P_1^{-1} M_j^{(0)} = Z_j^{(1)}.$$

Vamos provar que H_s ser verdadeira, para $1 \leq s < r$, implica que H_r será verdadeira. Começando pelos pivôs. Como Z é triangular superior e tem blocos identidade no bloco diagonal principal, então

$$P_r = A_r^T Z_r^{(r-1)} = \sum_{\ell=1}^{r-1} A_{r\ell} Z_{\ell r}^{(r-1)} + A_{rr}.$$

Pela hipótese de indução, $Z_r^{(r-1)} \geq \widetilde{Z}_r^{(r-1)} \geq 0$. Também, $A \in \mathcal{M}$, de maneira que, $A_{r\ell} \leq 0$, para $r \neq \ell$, assim, $A_{r\ell} Z_{\ell r} \leq A_{r\ell} \widetilde{Z}_{\ell r}$. Assim, $P_r \leq \widetilde{P}_r$. Havendo ainda descarte no pivô, só podemos aumentar $\widetilde{P}_r$ visto que é matriz $\mathcal{Z}$.

Pelo Lema 3.3, $P_r \in \mathcal{M}$ e, assim, $\widetilde{P}_r \in \mathcal{Z}$ e possui entradas diagonais estritamente positivas. Assim sendo, existe matriz diagonal $D, m \times m$, tal que $(P_r)_{ii} di > \sum_{j \neq i} |(P_r)_{ij}| dj$ para $i = 1, \ldots, m$. Portanto, como $(\widetilde{P}_r)_{ii} \geq (P_r)_{ii}$ e $|(P_r)_{ij}| \geq |(\widetilde{P}_r)_{ij}|$ tem-se que $(\widetilde{P}_r)_{ii} di > \sum_{j \neq i} |(\widetilde{P}_r)_{ij}| dj$ para $i = 1, \ldots, m$. Portanto, pelo Lema 3.1, $\widetilde{P}_r$ é uma matriz $\mathcal{M}$ não singular.

Até a $(r-1)$-ésima iteração $Z_j^{(r-1)}, j > r$ só preencheu nas $r-1$ primeiras posições bloco e na posição bloco j, pois trata-se de uma matriz identidade de ordem m, como indica o esquema a seguir:

$$Z_j^{(r-1)} = (\times, \cdots, \times, 0, 0, \cdots, I, 0, \cdots, 0)^T$$

Com relação aos diversos multiplicadores, $M_j^{(r-1)}$, podemos escrever

$$M_j^{(r-1)} = A_r^T Z_j^{(r-1)} = \sum_{\ell=1}^{r-1} A_{r\ell} Z_{\ell j}^{(r-1)} + A_{rj}.$$

Pela hipótese de indução, $Z_j^{(r-1)} \geq \widetilde{Z}_j^{(r-1)} \geq 0$ e $A \in \mathcal{M}$, segue que $M_j^{(r-1)} \leq \widetilde{M}_j^{(r-1)} \leq 0$, para $j > r$, pois $A_{ij} \leq 0$, para $i \neq j$.

Finalmente, vamos provar que $0 \leq \widetilde{Z}_j^r \leq Z_j^r$, para $j > r$. Temos que $\widetilde{Z}_j^r = \widetilde{Z}_j^{(r-1)} - \widetilde{Z}_r^{(r-1)} \widetilde{P}_r^{-1} \widetilde{M}_j^{(r-1)} \geq 0$. Então, como $0 \leq \widetilde{Z}_j^{(r-1)} \leq Z_j^{(r-1)}$, $0 \leq -\widetilde{M}_j^{(r-1)} \leq -M_j^{(r-1)}$ e, pelo Lema 3.5, $0 \leq \widetilde{P}_r^{-1} \leq P_r^{-1}$ segue do Lema 3.4 que

$$0 \leq \widetilde{Z}_j^r \leq Z_j^r.$$

□

Não podemos considerar que $\widetilde{Z}_i$ é uma cópia de Z_i com apenas algumas entradas anuladas. A construção dos vetores bloco $\widetilde{Z}_i$ e Z_i depende dos vetores $\widetilde{Z}_j$ e Z_j, com $1 \leq j < i$, respectivamente. Não há como calcular $\widetilde{Z}_i$ diretamente a partir de Z_i. Outro fato relevante é o tratamento dos pivôs, já que no caso escalar é apenas um número real e aqui é uma matriz quadrada. Provar que uma matriz é não singular é certamente mais complicado do que mostrar que um número é não nulo.

Por exemplo, considere a matriz a seguir, com uma estrutura em blocos de ordem 2,

$$\begin{pmatrix} 17 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 16 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 17 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 16 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 17 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 16 \end{pmatrix}$$

Sem descarte, o AINV produz $Z_3 = \begin{pmatrix} 0.0720 & 0.0720 \\ 0.0763 & 0.0763 \\ 0.0720 & 0.0720 \\ 0.0763 & 0.0763 \\ 1.0000 & 0.0000 \\ 0.0000 & 1.0000 \end{pmatrix}$. Agora, com descarte de 0.063 temos $\widetilde{Z}_3 = \begin{pmatrix} 0.0000 & 0.0000 \\ 0.0756 & 0.0756 \\ 0.0675 & 0.0675 \\ 0.0714 & 0.0714 \\ 1.0000 & 0.0000 \\ 0.0000 & 1.0000 \end{pmatrix}$.

4 Conclusões

No texto [3], discutimos que, sem descarte, o AINV para matrizes com estrutura de blocos possui menos restrições que o AINV escalar. Mais especificamente, para que o algoritmo com blocos funcione até o final, basta que os menores principais da ordem dos blocos não sejam nulos. Já com descarte, em [1] os autores provaram que o AINV não quebra (não possui pivôs iguais a zero) para matrizes $\mathcal{M}$. Agora, generalizamos esse resultado, demonstrando que o BAINV com descarte gera pivôs não-singulares quando tratamos de matrizes $\mathcal{M}$.

Agradecimentos

O primeiro autor agradece à CAPES pelo financiamento do projeto.

Referências

[1] M. Benzi, C. D. Meyer, e M. Tůma. *A sparse approximate inverse preconditioner for the conjugate gradient method. SIAM Journal on Scientific Computing*, 17(5):1135–1149, 1996.

[2] M. Benzi, R. Kouhia, and M. Tůma. *Stabilized and block approximate inverse preconditioners for problems in solid and structural mechanics. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(49-50):6533 – 6554, 2001.

[3] M. C. Almeida, L. M. Carvalho e M. F. Souza. *Um metodo para o Calculo da Inversa de Matrizes Simetricas e Positivas Definidas em Bloco.* Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics. v. 5, n.1, 2017.

[4] E. Chow and A. Patel. Fine-grained parallel incomplete LU factorization. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(2):C169–C193, 2015.

[5] A. Ostrowski, *Uber die Determinanten mit uberwiegender Hauptdiagonal*, Conment. Math. Hek. 10, 69-96. 1937.

[6] L. Grigori and S. Moufawad. Communication avoiding ilu0 preconditioner. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(2):C217–C246, 2015.

[7] J. A. Meijerink and H. A. van der Vorst. An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric m-matrix. *Math. Comp.*, 31:148–162, 1977.

[8] R. J. Plemmons. *M-matrix characterizations. I—nonsingular M-matrices. Linear Algebra and Its Applications*, 18:175–188, 1977.

[9] Y. Saad. Ilut: A dual threshold incomplete lu factorization. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 1(4):387–402, 1994.

[10] George T. Gilbert. *Positive Definite Matrices and Sylvester's Criterion. George T. Gilbert.* The American Mathematical Monthly. Vol. 98, No. 1, pp. 44-46. 1991.

[11] B. Yang, H. Liu, and Z. Chen. Accelerating linear solvers for reservoir simulation on gpu workstations. In *Proceedings of the 24th High Performance Computing Symposium*, HPC '16, pages 1:1–1:8, San Diego, CA, USA, 2016. Society for Computer Simulation International.

DOI: 10.5540/03.2018.006.02.0284