

УДК 519.61

Алгоритмічна реалізація модифікованого методу LU-факторизації при розгортанні визначників стрічкових матриць

Лазурчак І. І., Кобильник Т. П.

informatyka.drohobych.net

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра інформатики та обчислювальної математики, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

У статті розглядається метод розгортання визначників розріджених матриць, що застосовується при реалізації функціонально-дискретного методу для розв'язування задач на власні значення зі скалярними та матричними коефіцієнтами в диференціальному операторі.

Задачам на власні значення для одновимірною рівняння Шредінгера з нелокальними крайовими умовами, а особливо з інтегральними умовами, присвячено відносно мало робіт (у порівнянні з двоточковими крайовими умовами). Зокрема, робота [1] стосується нелокальних інтегральних умов. Розглядався ряд задач на власні значення, який формулюється у такій, більш загальній, постановці

$$u''(x) + [\lambda - q(x)]u(x) = 0, \quad x \in (0, 1), \quad (1)$$

$$u(0) = \int_0^1 u(x) d\sigma_0(x), \quad u(1) = \int_0^1 u(x) d\sigma_1(x), \quad (2)$$

де $\sigma_0(x)$, $\sigma_1(x)$ – задані функції обмеженої варіації, $q(x)$ – задана кусково-неперервна функція, причому $q(x) \geq 0$, $\forall x \in [0, 1]$.

Зокрема, були розглянуті для $q(x) \equiv 0$ такі три варіанти крайових умов (2):

- 1) $\sigma_0(x) \equiv 0$, $\sigma_1(x) = ax$;
- 2) $\sigma_0(x) \equiv 0$,

$$\sigma_1(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x < \frac{1}{4}, \\ ax, & \frac{1}{4} \leq x < \frac{3}{4}, \\ 0, & \frac{3}{4} \leq x \leq 1, \end{cases}$$

- 3) $\sigma_1(x) = a_1x$, $\sigma_2(x) = a_2x$, де a , a_1 , a_2 – задані параметри.

Тут ми обмежимося розв'язуванням задачі вигляду

$$u''(x) + [\lambda - q(x)]u(x) = 0, \quad x \in (0, 1), \quad (3)$$

$$u(0) = 0, \quad u(1) = a \int_{1/4}^{3/4} u(\xi) d\xi, \quad (4)$$

хоча запропонований нижче підхід може бути застосований і для випадку умов (2).

Функціонально-дискретний (FD-) метод, розроблений у роботі [2] і застосований до розв'язання задачі (3), (4), відіграє двояку роль. З одного боку він уможливорює досліджувати якісні властивості розв'язку задачі (3), (4) (дійсність власних значень, наявність комплексних власних значень, кратність спектру і т.д.) З іншого боку запропонований метод дає алгоритм для чисельного знаходження наближеного розв'язку задачі (3), (4) з будь-яким наперед заданим порядком точності. Відмінною рисою FD-методу є те, що для широкого класу задач на власні значення, його точність тим вища, чим старший порядковий номер відповідного власного значення; він не вимагає розв'язування повної алгебраїчної задачі на власні значення; він допускає вибірковий рахунок, а отже і розпаралелювання обчислень.

Нехай $q(x) = x$, $a = 20$. Тоді точний розв'язок ЗДР (1) має вигляд

$$u_n(x, \lambda_n) = C_n \sqrt{\lambda_n - x} \left(J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} (\lambda_n - x)^{3/2} \right) \times \right. \\ \left. \times J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} \lambda_n^{3/2} \right) - J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} (\lambda_n - x)^{3/2} \right) J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} \lambda_n^{3/2} \right) \right), \quad (5)$$

де $J_{\pm 1/3}(z)$ – циліндричні функції або функції Бесселя 1 роду. Зазначимо, що тут враховано першу крайову умову з (4), а C_n – довільна стала.

Точні власні значення λ_n визначаються з другої крайової умови в (4), тобто з рівняння

$$\Delta(\lambda_n) \equiv u_n(1, \lambda_n) - 20 \int_{1/4}^{3/4} u_n(x, \lambda_n) dx = 0. \quad (6)$$

Для досягнення збіжності FD-методу була вибрана на рівномірній сітці

$$\Omega_N = \{x_i = \frac{i}{N}, i = 0, \dots, N\}$$

апроксимуюча функція $\bar{q}(x)$ у вигляді кусково-постійної функції з кількістю "сходинок" рівною N

$$\bar{q}(x) = \left\{ \bar{q}_i = \frac{1}{2} [q(x_{i-1}) + q(x_i)], i = 1, \dots, N \right\}. \quad (7)$$

Якщо розв'язок базової задачі (3),(4) задати у вигляді

$$u_n^{(0)}(x, \bar{q}(\cdot)) = \begin{cases} c_1 \sin \sqrt{\lambda - \bar{q}_1} x, & 0 \leq x \leq x_1, \quad i = 1, \\ c_{2i-2} \sin \sqrt{\lambda - \bar{q}_i} x + \\ + c_{2i-1} \cos \sqrt{\lambda - \bar{q}_i} x, & x_{i-1} \leq x \leq x_i, \quad 2 \leq i \leq N, \end{cases}$$

то наближення нульового рангу $\lambda_n^{(0)}(\bar{q}(\cdot))$ та невідомі c_i ($i = 1, \dots, 2N - 1$) знаходяться з умови існування нетривіального розв'язку однорідної системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} ccu_n^{(0)}(x_i, \bar{q}_i) = u_n^{(0)}(x_i, \bar{q}_{i+1}), & i = \overline{1, N-1}, \\ \left[u_n^{(0)}(x, \bar{q}_i) \right]'_{x=x_i} = \\ = \left[u_n^{(0)}(x, \bar{q}_{i+1}) \right]'_{x=x_i}, & i = \overline{1, N-1}, \\ u_n^{(0)}(1, \bar{q}_N) = a \int_{1/4}^{3/4} u_n^{(0)}(\xi, \bar{q}(\cdot)) d\xi, \end{cases} \quad (8)$$

У випадку $N = 8$ при виборі кусково-сталості функції $\bar{q}(x)$ необхідно знайти нетривіальний розв'язок системи (8), який існує у випадку, коли її визначник рівний нулю. Проте програмні засоби пакету LinearAlgebra с.к.м. Maple 10.0 [3] не можуть забезпечити обчислення нулів розгорнутого в поліном детермінанта матриці розмірності 15×15 внаслідок недостатнього об'єму оперативної пам'яті або файла *підкачки*. Враховуючи те, що вказана матриця має 5-и діагональну структуру, проблему вдається вирішити, використовуючи модифікацію методу **LU**-факторизації, розробленого для систем з розрідженими матрицями [4]. Крім цього, обчислення нев'язки $|\Delta(\lambda_n)|$ із (6) у разі комплексно спряжених власних значень вдається здійснити лише при виборі достатньо великого значення для системної змінної ($Digits := 800$), яка встановлює кількість значущих цифр мантиси при проведенні чисельних розрахунків в арифметиці з "плаваючою" крапкою. Слід зазначити, що для обчислення інтегралів від власних функцій, які у свою чергу представляють інтеграли зі

змінною верхньою межею, необхідно для спрощення підінтегральних виразів використовувати серію процедур **simplify, expand, fnormal, evalc**.

Для багатьох задач матриця A є розрідженою, більшість елементів якої дорівнюють нулю. Такі матриці часто утворюються при різнищевій апроксимації диференціальних рівнянь. Елементи такої матриці, як правило, обчислюються за заданими формулами. Це досить важливо, оскільки порядок таких матриць може досягати кількох десятків і навіть сотень тисяч.

Вивчення багатьох задач приводить до необхідності виконання дії з матрицею, у якій кількість під- та наддіагоналей є однаковою. Як правило, такі матриці мають так звану стрічкову структуру. Матрицю A називають $(2p + 1)$ -діагональною (або матрицею, яка має стрічкову структуру), якщо $a_{ij} = 0$ при $|i - j| > p$, де p – кількість піддіагоналей (наддіагоналей). Число $2p + 1$ називають шириною стрічки. Такі матриці утворюються, наприклад, при знаходженні власних значень диференціального рівняння із заданими крайовими умовами. У процесі розв'язування такої задачі необхідно обчислити визначник тридіагональної матриці. Для обчислення визначника тридіагональної матриці розроблені спеціальні формули (див., наприклад, [5]).

У процесі розв'язування задач виникають випадки, коли необхідно обчислити визначник $(2p + 1)$ -діагональної матриці великої розмірності (наприклад, $n = 10000$). У такому випадку зручно використовувати метод LU-факторизації з децю зміненими формулами:

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{i_1, i_2}, \quad i \geq j,$$

$$u_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right) / l_{ii}, \quad i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{i_1, i_2}, \quad i < j, \quad (9)$$

$$i_1 = \max\{1, i-p\}, \quad i_2 = \min\{n, i+p\}, \quad \det A = \prod_{i=1}^n l_{ii}.$$

Крім того, для програмної реалізації формул (9), необхідно оголошувати три масиви розмірності $n \times n$. Тому пропонується такий підхід до обчислення визначника симетричної стрічкової матриці шириною $(2p + 1)$.

Тому зі стрічкових квадратних матриць $A_{n \times n}$, $L_{n \times n}$ та $U_{n \times n}$ сформуємо прямокутні матриці $Q_{n \times (p+d+1)}$ та $R_{n \times (p+d+1)}$ за таким правилом:

$$q_{i,p+j-i+1} = a_{ij},$$

$$r_{i,p+j-i+1} = \begin{cases} l_{ij}, & i \geq j, \\ u_{ij}, & i < j, \end{cases}, \quad (10)$$

$$i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{i_1, i_2}.$$

Інші елементи q_{ij} та r_{ij} дорівнюють нулю. У результаті утворена матриця Q буде мати вигляд:

$$\begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & q_{1,p+1} & \dots & q_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & & & & & \\ q_{p+1,1} & & & & & \\ \vdots & & & & & \\ & & & & & q_{n-(p+1),n} \\ q_{n1} & \dots & q_{n,p+1} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

і містити тільки $(p+1)p$ нулів. Такий самий вигляд буде мати і матриця R .

Тоді елементи матриці R згідно з (10) будуть обчислюватися за формулами:

$$r_{ij} = q_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} r_{ik} r_{i-p+k-1, j+p-k+1},$$

$$i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{1, p+1},$$

$$r_{ij} = (q_{ij} - \sum_{\substack{k=j-p \\ k>0}}^p r_{ik} r_{i-p+k-1, j+p-k+1}) / r_{i,p+1}, \quad (11)$$

де

$$i-p+k-1 \geq 1, \quad j+p-k+1 \leq 2p+1, \quad i \in \overline{1, n},$$

$$j \in \overline{p+2, 2p+1}.$$

Крім того, існують випадки, коли у процесі розв'язування задачі необхідно обчислювати визначники несиметричних стрічкових матриць. Наведемо формули для обчислення визначника несиметричної стрічкової матриці, використовуючи модифікацію методу LU -факторизації.

Нехай задана стрічкова матриця шириною $p+d+1$, де p – кількість піддіагоналей, d – кількість наддіагоналей. Тоді формули (9) набудуть вигляду:

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{i_1, i_2}, \quad i \geq j,$$

$$u_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right) / l_{ii},$$

$$i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{i_1, i_2}, \quad i < j, \quad (12)$$

$$i_1 = \max\{1, i-p\}, \quad i_2 = \min\{n, i+d\}, \quad \det A = \prod_{i=1}^n l_{ii},$$

де p – кількість ненульових піддіагоналей, d – кількість ненульових наддіагоналей матриці A . Для програмної реалізації формул (11) знову необхідно оголошувати три масиви розмірності $n \times n$.

Тому зі стрічкових матриць A , L та U сформуємо прямокутні матриці $Q_{n \times (p+d+1)}$ та $R_{n \times (p+d+1)}$ наступним чином:

$$q_{i,p+j-i+1} = a_{ij}, \quad r_{i,p+j-i+1} = \begin{cases} l_{ij}, & i \geq j, \\ u_{ij}, & i < j, \end{cases},$$

$$i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{i_1, i_2}.$$

Інші елементи q_{ij} та r_{ij} дорівнюють нулю.

Тоді формули (11) можна переписати у вигляді:

$$r_{ij} = q_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} r_{ik} r_{i-p+k-1, j+p-k+1},$$

$$i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{1, p+1},$$

$$r_{ij} = (q_{ij} - \sum_{\substack{k=j-d \\ k>0}}^p r_{ik} r_{i-p+k-1, j+p-k+1}) / r_{i,p+1},$$

$$i-p+k-1 \geq 1, \quad j+p-k+1 \leq d+p+1,$$

$$i \in \overline{1, n}, \quad j \in \overline{p+2, p+d+1}.$$

Тоді

$$\det A = \prod_{i=1}^n r_{i,p+1}.$$

Якщо системи комп'ютерної математики такі, як Mathematica, Maple мають можливість задання матриць у вигляді стрічок, то класичні мови програмування (Pascal) вимагають задання всіх елементів матриць, що своєю чергою вимагає виділення додаткового об'єму оперативної пам'яті ЕОМ.

Програмна реалізація запропонованого алгоритму проведена у кількох системах комп'ютерної математики таких, як Mathematica 6.0, Maple 10.0, Maxima 5.16.0. Зокрема, система Maxima – одна з програм для виконання математичних обчислень, символьних перетворень, а також для побудови різноманітних графіків. Складні обчислення оформляються у вигляді окремих процедур, що можуть потім використовуватися при розв'язуванні інших задач. Система поширюється під ліцензією GPL і

доступна користувачам як ОС Linux, так і користувачам ОС Windows.

Створені у системі Maxima 5.16.0 програми *lust* та *lunsm*, за якими обчислюються визначники симетричної та несиметричної стрічкової матриці *A*. Програма *lust* містить два аргументи: перший власне матриця, визначник якої потрібно обчислити; другий – кількість під(над)діагоналей. Програма *lunsm* містить три аргументи: перший власне матриця, визначник якої потрібно обчислити; другий – кількість під(над)діагоналей, третій – кількість піддіагоналей.

Для використання створених програм до них потрібно звернутися за допомогою вказівки *load(name)*, де *name* – назва створеної програми (*lust* або *lunsm*). Надалі програми використовуються аналогічно до команд системи Maxima.

Для створення власної команди потрібно створити файл з розширенням *mac* і помістити його в папку *C:\Program Files\Maxima-5.13.0\share\maxima\5.16.0\share*.

Запропонований підхід дає змогу значно зменшити кількість обчислювальних затрат, включаючи об'єм RAM та час CPU.

Системи комп'ютерної математики містять команди для обчислення визначників матриць. Однією з умов ефективного використання певної СКМ для розв'язування задачі є зменшення затрат ча-

су на розв'язування поставленої задачі. Зрозуміло, що СКМ містять функції для обчислення визначників. Проте при великих розмірностях матриць (навіть числових) кількість часу на обчислення визначників значно зростає. Ще гірша ситуація, коли елементами матриці є функції (символьні величини). Наприклад, за командою *Det[A]* у системі Mathematica обчислюється визначник квадратної матриці *A*, у системі Maple визначник можна обчислити за командами *det(a)* (пакет *linalg*) або *Determinant(A)* (пакет *LinearAlgebra*), у системі Maxima – за командою *determinant(A)* (послуга *Визначник* пункту меню *Алгебра*).

Цікавим є дослідження, яке проводить С. Стейнхаус (Stephan Steinhaus) [6] стосовно характеристик СКМ. Згідно з його дослідженням, для обчислення детермінанта матриці (елементи якої є псевдовипадкові числа) розмірності 1500×1500 потрібно приблизно від 20 (система O-Matrix 6.3) до 505 секунд (система GAUSS 8.0). Серед найбільш поширених СКМ (Maple, Mathematica, Matlab) найкращий результат у системі Mathematica 6.0 (24,3 сек.). Дослідження проводилися на комп'ютері з процесором Intel Quad Core Q6000 з тактовою частотою 2,4 GHz і розміром оперативної пам'яті 2 GB під управлінням операційної системи Windows Vista Home.

Бібліографія

- [1] Sapagovas M.P. The eigenvalues of some problems with a nonlocal condition // Differ. Equations. – 2002. – 38, № 7. – P. 1020–1026.
- [2] Makarov V.L. On a functional difference method of arbitrary order of precision for solving the Sturm-Liouville problem with piecewise smooth coefficients // Soviet. Math. Dorel. – 1992. – 44, № 2. – P. 391–396.
- [3] Говорухин В., Цибулин В. Компьютер в математическом исследовании. Maple, Matlab, LaTeX. – С-Пб.: Питер, 2001. – 620 с.
- [4] Кобильник Т.П., Лазурчак І.І., Остапчук Л.А. Модифікація методу LU-факторизації для обчислення визначників розріджених матриць // Міжнародна математична конференція ім. В.Я. Скоробогатька (27.09–1.10 2004, м. Дрогобич) [Тези доповідей]. – Львів: 2004. – С. 247.
- [5] Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978. – 592 с.
- [6] Steinhaus S. Comparison of mathematical programs for data analysis (Edition 5.03) [Електронний ресурс]. – Munchen/Germany. – 64 p. – Режим доступу: <http://www.scientificweb.de/ncrunch/>.