Waveletový přístup k násobení matic

P. Hora

Úvod

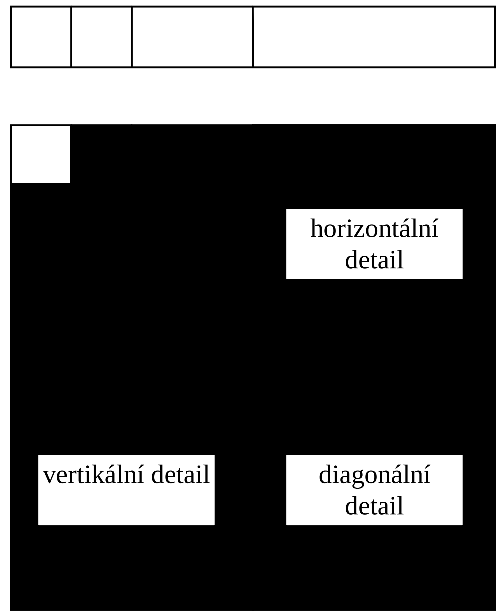
Účelem tohoto článku je popsat numerický algoritmus určený pro rychlé vynásobení plné matice s vektorem. Jak je známo, přímé vynásobení plné matice řádu N s vektorem délky N vyžaduje zhruba N^2 operací. Tato skutečnost je příčinou vážných obtíží při rozsáhlých výpočtech. Například hlavní důvod pro omezené využití integrálních rovnic jako numerického nástroje při rozsáhlých problémech je skutečnost, že integrální rovnice normálně vedou na plný systém lineárních algebraických rovnic, který musí být řešen přímo nebo iteračně. Většina iteračních metod pro řešení systémů lineárních rovnic spočívá v postupném násobení matice systému s posloupností rekursivně generovaných vektorů, což je neúnosně nákladné pro rozsáhlé problémy. Situace je ještě horší, pokud se na lineární systém použije přímý řešič, poněvadž ten normálně vyžaduje N^3 operací. Proto se většina oblastí výpočetní matematiky plným maticím, kdykoli je to možné, jednoduše vyhne. Například metody konečných diferencí a konečných prvků lze považovat za nástroje pro redukci parciální diferenciální rovnice na řídký lineární systém.

Algoritmy určené pro rychlé vynásobení plné matice s vektorem, které budou popsány v tomto článku [1], jsou založeny na waveletové transformaci [2,3] a vyžadují zhruba $N \log N$ resp. N operací (podle použité metody realizace matice).

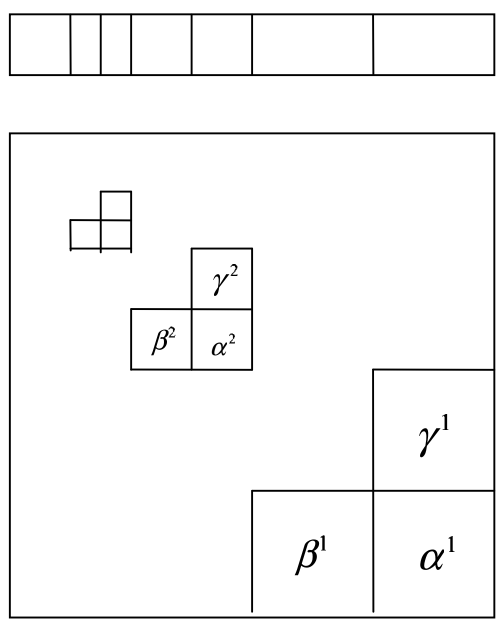
Reprezentace matic (operátorů)

V článku budeme používat dvě schémata pro numerické vyhodnocení integrálních operátorů. První je jednoduchá realizace (*standardní forma*) matice operátoru ve waveletové bázi (viz obr.1). Sestavení tohoto schématu [4] vyžadujeje přibližně $N \log N$ operací. Tato jednoduchá realizace matice je užitečným numerickým nástrojem sama o sobě, rozsah použitelnosti se však podstatně rozšíří druhou realizací (*nestandardní tvar*) matice operátoru ve waveletové bázi (viz obr 2), která vyžaduje řádově pouze N operací [4].

Standardní reprezentace operátoru spočívá v prostém tenzorovém součinu. Nestandardní reprezentace je naopak definována jako množina tří druhů bázových funkcí [4], viz obr. 2.



Obr. 1 Standardní reprezentace dekomponovaného vektoru a matice.



Obr. 2 Nestandardní reprezentace dekomponovaného vektoru a matice. Jediné nenulové prvky dekomponované matice jsou obsaženy v submaticích α, β a γ .

Existují dva způsoby výpočtu standardního tvaru matice. První spočívá v aplikaci jednorozmerné waveletové transformace na každý sloupec resp. řádek matice, na což navazuje aplikace téže jednorozmerné transformace na každý řádek resp. sloupec předchozího výsledku. Druhý způsob vychází z nestandardního tvaru, na který se aplikuje jednorozměrná waveletová transformace na každý řádek všech operátorů β a každý sloupec všech operátorů γ.

Nestandardní forma algebraicky odpovídá zobrazení původního vektoru délky N do prostoru dimenze $2N-2$, kde jsou všechny škály nepropojené a ve kterém se původní transformace stává řídkou.

Obecně algoritmy používající standardní formu vyžadují zhruba $N \log N$ operací a algoritmy používající nestandardní formu vyžadují zhruba N operací.

Násobení matic ve standardním tvaru

Násobení matic ve standardním tvaru je založeno na následující skutečnosti: Standardní tvar je reprezentace v ortonormální bázi (coč je tenzorový součin jednorozměrných bází), proto výsledek násobení dvou standardních tvarů je také standardní tvar ve stejné bázi.

Na základě tohoto poznatku nyní sestavíme algoritmus řešící tento problém:

- Problém:

Nechť $\mathbf{A}$ je plná matice velkého řádu n. Naším úkolem je provést velký počet L násobení matice $\mathbf{A}$ vektorem $\mathbf{x}$.

- Idea:

Etapa 1: (prováděná pouze jednou) provádí standardní dekompozici matice $\mathbf{A}$ do waveletové báze a nastavení všech prvků dekomponované matice, jejichž hodnoty jsou menší než prahová úroveň, na nulu. Výslednou matici označme $\mathbf{A}_\varepsilon^\mathbf{w}$.

Etapa 2: (prováděná L-krát) je rozdělena do následujících třech kroků:

1. Standardní dekompozice vektoru $\mathbf{x}$ do waveletové báze.
2. Výpočet násobení ve waveletové bázi využívající řídkosti matice $\mathbf{A}_\varepsilon^\mathbf{w}$.
3. Rekonstrukce výsledku násobení.

Parametry v tomto algoritmu jsou:

- druh waveletu,
- úroveň waveletové dekompozice,
- práhová úroveň.

Pro volbu druhu waveletu je důležitý počet jejich nulových momentů. Platí, že čím více má wavelet nulových momentů, tím větší řídkosti dekomponované matice se dosáhne. Haarův wavelet má pouze jeden nulový moment, a proto se pro uvedený algoritmus moc nehodí.

Daleko výhodnější je používat skupinu waveletů profesorky Daubechies [2], Dn, u kterých Dn wavelet má $2n$ nulových momentů. (Poznámka: D2 wavelet odpovídá Haarovu waveletu.)

Úroveň waveletové dekompozice se obvykle volí 3 až 5.

Prahovou úroveň pro vynulování prvků dekomponované matice je třeba zvolit podle požadované přesnosti.

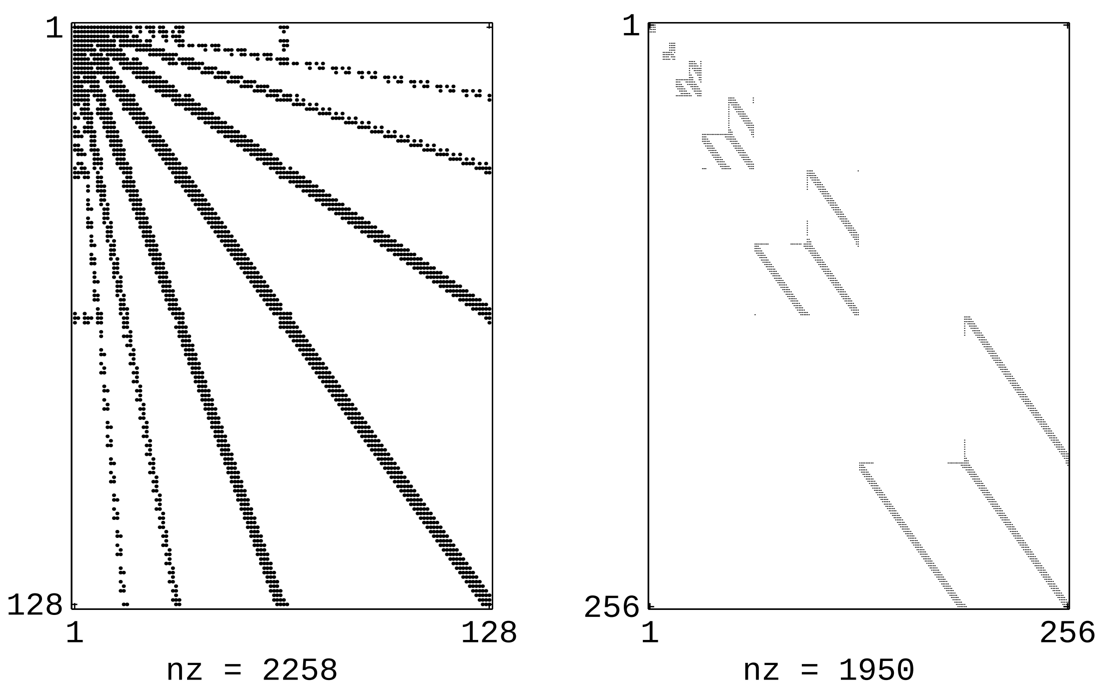
Ukázka výpočtu

V této ukázce předvedeme výsledky násobení matice $\mathbf{A}$ řádu 128, pro kterou platí

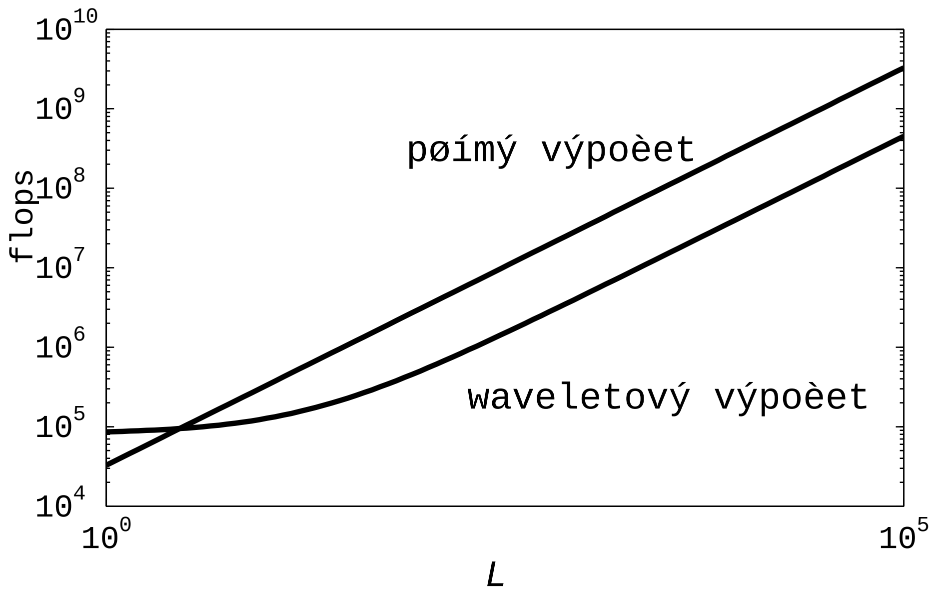
$$A_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{i-j} & i \neq j, \\ 1 & i = j, \end{cases}$$

vektorem $\mathbf{x}$, $x_i = i$. Byl použit wavelet D6 (Daubechies wavelet řádu 3 se 6 nulovými momenty) a 5. úroveň dekompozice. Prahová úroveň pro vynulování prvků dekomponované matice byla stanovena na 0.01.

Na obr. 3 jsou znázorněny nenulové prvky dekomponované matice ve standardním a nestandardním tvaru. Standardní tvar je charakteristický „prstovým“ uspořádáním prvků, kdežto nestandardní tvar má pásový charakter. Čísla uvedená pod obrázky představují počet nenulových prvků matic. Za pozornost stojí menší počet nenulových prvků u nestandardního tvaru. Na obr. 4 je vykresleno porovnání výpočetní náročnosti přímého násobení a násobení pomocí waveletové transformace v podobě závislosti počtu operací v pohyblivé řádové čárce (flops) na počtu provedených násobení (L). Obě osy jsou v logaritmickém měřítku. Ze této závislosti je patrné, že waveletový výpočet násobení je již pro čtyři násobení výhodnější než přímý výpočet a pro sto a více násobení dochází téměř k desetinásobnému urychlení.



Obr. 3 Příklad matice ve standardním (vlevo) a nestandardním (vpravo) tvaru.



Obr. 4 Porovnání výpočetní náročnosti přímého násobení a násobení pomocí waveletové transformace. L je počet provedených násobení.

Daleko přesnější by bylo vynesení závislosti skutečných dob výpočtu na počtu provedených násobení, ale jelikož byl zkušební příklad výpočtu waveletového násobení naprogramován pomocí Waveletového toolboxu MATLABu [5], tedy v interpretačním prostředí, a přímý výpočet násobení proveden vestavěnou funkcí MATLABu, tj. kompilačně, byly by získané doby výpočtů nesouměřitelné.

V následující tabulce jsou uvedeny hodnoty relativních chyb a řídkosti pro různé prahové úrovně a pro dva typy waveletů, Haarův wavelet a wavelet D6 prof. Daubechies. Pro oba typy waveletů bylo použito 5. úrovně dekompozice.

Prahová	Haarův wavelet		Wavelet D6 prof. Daubechies	
úroveň	Řídkost	Rel. chyba [%]	Řídkost	Rel. chyba [%]
0	1.0000	0	1.0000	0
1.0e-05	0.7036	0.0005	0.4082	0.0010
1.0e-04	0.4439	0.0088	0.3186	0.0234
1.0e-03	0.2422	0.4871	0.2388	0.2742
1.0e-02	0.1207	3.7258	0.1378	2.6738
1.0e-01	0.0449	20.462	0.0530	27.151

Závěr

V článku popsaná metoda rychlého násobení matice s vektorem je jen malou částí rozsáhlé teorie aplikace waveletů v numerické analýze. V této překotně se rozvíjející oblasti numerické matematiky se nyní pozornost soustřeďuje především na:

- problémy iteračních algoritmů, které waveletový přístup znovu vynesl na světlo popularity,
- problémy vyšších dimenzí,
- problémy nelineárních operátorů.

Práce popsaná v tomto článku byla podporována Grantovou agenturou České republiky prostřednictvím grantu č.101/94/0971 "Nové metody vyhodnocování signálů akustické emise" a uskutečněna v Ústavu fyzikálního inženýrství Fakulty aplikovaných věd Západočeské univerzity v Plzni.

Literatura

[1] Beylkin, G.; Coifman, R.; Rokhlin, V.: *Fast Wavelet Transforms and Numerical Algorithms I.* Communications on Pure and Applied Mathematics, Vol.XLIV, 141-183, (1991)

[2] Daubechies, I.: *Ten Lectures on Wavelets.* CBMS-NSF Series v Applied Mathematics, SIAM, (1991)

[3] Hora, P.: *Waveletová analýza: Díl I.- Teoretický úvod.* Výzkumná zpráva ÚFY FAV ZČU, 144VP, Plzeň, (1996)

[4] Beylkin, G.; Coifman, R.; Rokhlin, V.: *Wavelet in Numerical Analysis.* In Wavelets and Their Applications, ed. M. B. Ruskai ... [et al.], 181-210, Jones and Bartlett Publishers, (1992)

[5] Misiti, M.; Misiti, Y.; Oppenheim, G.; Poggi, J-M.: *Wavelet Toolbox User's Guide*. The MathWorks, Inc., (1996)

Multiplication of matrices using the wavelet approach

In this paper is described the algorithm for the rapid numerical applying a dense matrix $N \times N$ to a vector. As is well known, applying directly a dense $N \times N$-matrix to a vector requires roughly N^2 operations, and this simple fact is a cause of serious difficulties encountered in large-scale computations. The algoritm of this paper require order $\mathrm{O}(N \log N)$ operations.

Ing. Petr Hora, CSc., Západočeská univerzita v Plzni, Fakulta aplikovaných věd, Ústav fyzikálního inženýrství, Veleslavínova 11, 301 14 Plzeň (tel.: 019-7236415, fax.: 019-7220787, e-mail: hora@hera.zcu.cz).