

Aplicação do Algoritmo de Cuthill-McKee em Matrizes de Hodge para o Método da Esparsificação Recursiva[†]

J.L.P. LUIZ^{1*}, B.F.C. SILVA¹, G.M.C. MAGALHAES¹, A.S. MOURA²,
R.R. SALDANHA³ e E.J. SILVA³

Recebido em 29 novembro, 2013 / Aceito em 28 maio, 2015

RESUMO. A solução de sistemas lineares esparsos de alta ordem está inserido em vários ramos da ciência, como por exemplo a engenharia. Por conseguinte, tem havido um grande esforço para resolver ou apresentar soluções aproximadas de tais sistemas de forma eficiente. Neste trabalho combina-se o método da esparsificação recursiva com o algoritmo de Cuthill-McKee para obter uma aproximação esparsa para a inversa de uma classe de matrizes esparsas denominadas matrizes de Hodge.

Palavras-chave: esparsificação recursiva, matriz de Hodge, algoritmo de Cuthill-McKee.

1 INTRODUÇÃO

A solução de sistemas esparsos de alta ordem está inserida em vários ramos da ciência, como por exemplo, a engenharia. Por conseguinte, tem havido um grande esforço para resolver ou apresentar soluções aproximadas de tais sistemas de forma eficiente.

Quando se trata de problemas de propagação de ondas eletromagnéticas utilizando a teoria de formas diferenciais [1]-[6], tem-se que as equações de Maxwell em sua forma semi-discreta se comportam como um sistema linear esparsos de alta ordem. A solução de problemas desse tipo consiste na resolução de um sistema linear esparsos definido pela inserção das relações constitutivas através das matrizes de Hodge em cada passo de tempo [5].

[†]Trabalho apresentado no Congresso de Matemática Aplicada e Computacional-Nordeste, em novembro de 2012, Natal-RN.

*Autor correspondente: José Lucas Pereira Luiz

¹Departamento de Ciências Exatas, DCEX, UFVJM – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, 39803-853 Teófilo Otoni, MG, Brasil.

E-mails: lucasvt09@hotmail.com; brunobfcs@ymail.com; gaublis@hotmail.com

²Departamento de Economia, UFJF – Universidade Federal de Juiz de Fora, Av. Dr. Raimundo Monteiro Rezende, 330, Centro, 35010-177 Governador Valadares, MG, Brasil. E-mail: alex.moura@ufjf.edu.br

³Departamento de Engenharia Elétrica, UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil. E-mails: rodney@cpdee.ufmg.br; elson@cpdee.ufmg.br

Conforme [5], um FETD⁴ incondicionalmente estável, totalmente explícito, e esparso de malha simplicial é obtido utilizando uma aproximação esparsa da inversa da matriz de Hodge. Nesta abordagem, a inversa da Matriz de Hodge deve ser explicitamente calculada para obter uma aproximação esparsa, e isso acarreta custos computacionais consideráveis.

Ainda em [5] é apresentado uma técnica de esparsificação para inversa da matriz de Hodge pelo particionamento recursivo da matriz em blocos. A ideia fundamental é aproximar as submatrizes por matrizes esparsas durante o processo de inversão por blocos. Experimentos numéricos mostram que o método leva a um menor número de operações no processo de inversão (ou seja, a um menor custo computacional) e é incondicionalmente estável.

Neste paper será mostrado que a utilização do algoritmo de Cuthill-McKee [2] sobre as matrizes de Hodge pode diminuir de uma maneira considerável o tempo de processamento para esparsificação recursiva.

2 MATRIZES DE HODGE

As Matrizes de Hodge são matrizes geradas a partir das relações constitutivas dos meios materiais. A essência destas matrizes está relacionada ao tipo de discretização, ou seja, serão construídas em função do tipo de malha utilizada. Se durante a discretização é utilizada uma malha estruturada como FDTD⁵, obtêm-se as matrizes de Yee-Hodge, por outro lado, se forem utilizadas malhas não estruturadas como no FEM⁶, têm-se as matrizes do tipo Galerkin-Hodge [6].

As matrizes de Yee-Hodge, geradas a partir de malhas hexaédricas, são diagonais. Com isso, o cálculo dos graus de liberdade das Equações de Maxwell, que envolve a inversão da matriz de Hodge, se torna algo trivial. Por outro lado, a discretização com elementos de Whitney gera a matrizes de Galerkin-Hodge, que são não diagonais, definida positiva, simétrica e esparsa. Essas matrizes possuem inversas tipicamente cheias, o que motiva o uso de técnicas para obtenção de uma matriz diagonal aproximada para a inversa dessa classe de matrizes. Em [5] encontramos o Método da Esparsificação. De maneira geral as Matrizes de Galerkin-Hodge podem ser calculadas pela expressão

$$\mathbf{M}_p(\alpha) = \int_{\Omega} \alpha \omega_p^i \cdot \omega_p^j d\Omega \quad (2.1)$$

onde α denota um dos campos escalares: ϵ (permissividade elétrica), ν (relutividade) ou σ (condutividade elétrica do meio). ω_p^i e ω_p^j são 1 ou 2-formas de Whitney e Ω é o domínio de integração.

A motivação para se obter explicitamente a inversa esparsa da matriz de Hodge é para calcular a solução do problema dado pelo sistema,

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{b} + \mathbf{R} \mathbf{e} &= 0 \\ -\partial_t \mathbf{M}_1(\epsilon) \mathbf{e} + \mathbf{R}^T \mathbf{M}_2(\nu) \mathbf{b} &= 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

⁴Finite-Element Time-Domain.

⁵Finite-Difference Time-Domain.

⁶Finite Element Method.

Esse sistema representa as Equações de Maxwell em sua forma discreta acrescida das relações constitutivas inseridas via as matrizes de Hodge $\mathbf{M}_1(\epsilon)$ e $\mathbf{M}_2(\nu)$ em cada passo de tempo. No sistema, temos que \mathbf{b} e \mathbf{e} são vetores grau de liberdade localizados nas faces e bordas da malha primal, \mathbf{R} é a matriz de incidência face-aresta, $\mathbf{M}_1(\epsilon)$ e $\mathbf{M}_2(\nu)$ são matrizes de Hodge.

Em (2.2), \mathbf{b} é naturalmente explícito. Para se obter um método explícito para o sistema é necessário resolver a segunda equação em (2.2) para \mathbf{e} , e para isso é preciso calcular a inversa da matriz de Hodge $\mathbf{M}_1(\epsilon)$.

3 O MÉTODO DA ESPARSIFICAÇÃO RECURSIVA

O fato das Matrizes Yee-Hodge serem diagonais dispensa o uso do método da esparsificação recursiva, pois a inversa dessa classe de matrizes são facilmente obtidas sem grandes custos computacionais. Contudo, as Matrizes de Galerkin-Hodge são não diagonais, e por vezes, o cálculo de sua inversa envolve um custo computacional considerável. Sendo assim, o uso de técnicas como o Método da Esparsificação Recursiva torna-se aplicável a fim de diminuir esse custo computacional.

A técnica de Esparsificação Recursiva da inversa da matriz de Hodge consiste no particionamento recursivo desta matriz em blocos. A ideia fundamental é aproximar as submatrizes por matrizes esparsas durante o processo de inversão por blocos. Experimentos numéricos apresentados em [5] mostram que o método leva a um menor número de operações no processo de inversão (ou seja, a um menor custo computacional) e é incondicionalmente estável.

O método de esparsificação recursiva da inversa da matriz de Hodge é baseada na seguinte fórmula de inversão por bloco:

$$\mathbf{D}_{i-1}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_i^{-1} & \mathbf{X}_i \\ \mathbf{X}_i^T & \mathbf{S}_i \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{D}_0^{-1} = \mathbf{M}^{-1}$ e

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_i &= \mathbf{A}_i - \mathbf{B}_i \mathbf{D}_i^{-1} \mathbf{B}_i^T \\ \mathbf{X}_i &= -\mathbf{Q}_i^{-1} \mathbf{B}_i \mathbf{D}_i^{-1} \\ \mathbf{S}_i &= \mathbf{D}_i^{-1} - \mathbf{D}_i^{-1} \mathbf{B}_i^T \mathbf{X}_i \end{aligned} \quad (3.2)$$

As expressões em (3.1) e (3.2) surgem a partir do particionamento de uma matriz que é descrito da seguinte maneira:

$$\mathbf{D}_{i-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_i & \mathbf{B}_i \\ \mathbf{B}_i^T & \mathbf{D}_i \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Note que a inversão da matriz \mathbf{D}_0 de ordem $n \times n$ se reduz a inversão de uma matriz \mathbf{D}_1 de ordem $(n - q) \times (n - q)$ e uma matriz \mathbf{Q}_1 de ordem $(q \times q)$, onde $0 < q < n$. A fórmula de inversão pode ser aplicada recursivamente na matriz \mathbf{D}_1 , levando a uma sequência de tamanho decrescente de matrizes.

$$\mathbf{M} = \mathbf{D}_0, \mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_k \quad (3.4)$$

onde

$$k = \lfloor \log_{q/n}(1/n) \rfloor \tag{3.5}$$

e \mathbf{D}_i é o bloco de \mathbf{D}_{i-1} , para $i = 1, 2, \dots, k$, tal que a inversa \mathbf{M}^{-1} é obtida pelas substituições sucessivas através da sequência

$$\mathbf{D}_k^{-1}, \mathbf{D}_{k-1}^{-1}, \dots, \mathbf{D}_1^{-1}, \mathbf{D}_0^{-1} = \mathbf{M}^{-1} \tag{3.6}$$

As matrizes em (3.6) podem ser aproximadas por matrizes esparsas, para se obter uma sequência de matrizes esparsas

$$\mathbf{D}_{k_s}^{-1}, \mathbf{D}_{(k-1)_s}^{-1}, \dots, \mathbf{D}_{0_s}^{-1} = \mathbf{M}_s^{-1} \tag{3.7}$$

para aproximar a sequência descrita em (3.6).

Após cada inversão das matrizes em (3.6), a respectiva matriz \mathbf{D}_k^{-1} é esparsificada para uma matriz $\mathbf{D}_{k_s}^{-1}$ de maneira que os coeficiente fora da diagonal da matriz $\mathbf{D}_k^{-1} = [d_{ij}]$ são zerados quando

$$|d_{i \neq j}| \leq r \min \left| \text{diag } \mathbf{D}_k^{-1} \right| \tag{3.8}$$

onde $0 < r < 1$ é o parâmetro threshold.

Este critério é utilizado devido os maiores valores da matriz de Hodge estarem localizados em sua diagonal, induzindo desta forma naturalmente um valor de corte, que é dado por uma fração do menor coeficiente diagonal.

O interesse do método está em se obter de uma maneira eficiente uma aproximação para a inversa da matriz de Hodge que seja esparsa e que não perca as características da matriz inversa original, tais como a positividade definida e a forte localização dos elementos.

Em [5] é mostrado que o método não afeta a estabilidade do sistema apresentado em (2.2), devido ao fato do sinal dos autovalores não ser alterado e de se manter a forte concentração dos termos de maior grandeza em torno da diagonal principal.

4 ALGORITMO DE CUTHILL-McKEE

Dada uma matriz simétrica $\mathbf{M} = (m_{i,j})$, de dimensões $n \times n$, define-se *largura de banda* como sendo a maior distância de um elemento não nulo à diagonal principal, que é dada por:

$$\beta = \max |i - j|, \quad m_{i,j} \neq 0 \tag{4.1}$$

O algoritmo de Cuthill-Mckee trabalha com o objetivo de diminuir a largura de banda (β) dessa matriz \mathbf{M} , que é tratada pelo algoritmo como uma matriz de adjacência de um grafo.

A ideia básica do algoritmo é encontrar e efetuar uma permutação em \mathbf{M} de forma que as entradas não nulas se aproximem da diagonal principal. Para encontrar tal permutação ele percorre todas as entradas da matriz verificando as não nulas e armazenado os valores i e j de sua posição

numa matriz unidimensional que é gerada durante o processo, esses valores representam os nós de um grafo gerado pela matriz, que posteriormente será percorrido partindo sempre dos nós que possuem menos ligações, gerando assim a permutação que será aplicada em \mathbf{M} .

Na Figura 1 a seguir, note que o grafo é gerado a partir da matriz \mathbf{M} , a qual se deseja diminuir a largura de banda, a partir do grafo a permutação $q = \{4, 1, 5, 2, 3\}$ é construída e aplicada na matriz \mathbf{M} , gerando assim a matriz \mathbf{M}' , onde já pode ser observado a alocação dos elementos não-nulos da matriz próximos à diagonal. Observe que a permutação $q = \{4, 1, 5, 2, 3\}$ é obtida partindo do número 4 que possui apenas uma ligação e seguindo a ordem crescente de ligações no grafo, atingindo assim todos os nós.

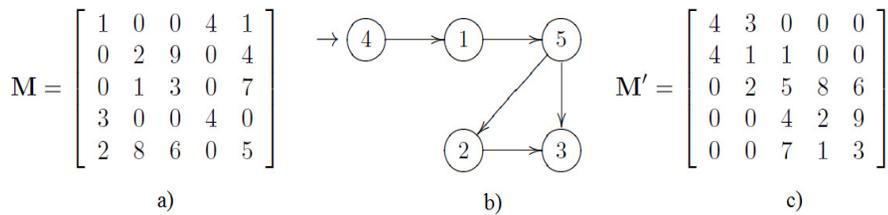


Figura 1: (a) Matriz Simétrica \mathbf{M} , (b) Grafo que gera a permutação $q = \{4, 1, 5, 2, 3\}$, (c) Matriz \mathbf{M}' , que é obtida a partir da aplicação da permutação q sobre a matriz \mathbf{M} .

Dessa forma o Algoritmo de Cuthill-Mckee faz com que os elementos não nulos de uma matriz fiquem concentrados próximo à diagonal principal, diminuindo a largura de banda da matriz e possibilitando obter ganhos computacionais quando utilizado juntamente com o método da esparsificação recursiva na inversão da Matriz de Hodge, como será visto posteriormente.

5 APLICAÇÃO DO ALGORITMO DE CUTHILL-MCKEE COM O MÉTODO DA ESPARSIFICAÇÃO RECURSIVA

A aplicação do algoritmo de Cuthill-Mckee juntamente com o método da esparsificação recursiva tem como objetivo reduzir o tempo de processamento para a inversa da Matriz de Hodge, porém sem perder as características da matriz inversa original, como a positividade definida e a forte localização dos elementos não nulos próximo à diagonal.

Na Figura 1, pôde ser visto que o Algoritmo de Cuthill-Mckee aplica uma permutação na matriz \mathbf{M} , e essa permutação faz com que os elementos não nulos de \mathbf{M} se aproximem da diagonal principal, diminuindo assim a largura de banda da matriz. Na Figura 2 é mostrado uma Matriz de Hodge convencional e sua configuração após ser tratada pelo Algoritmo de Cuthill-Mckee.

Ao combinar o método da esparsificação recursiva com o algoritmo de Cuthill-Mckee pode ser observado que alguns blocos da matriz de Hodge será composta em grande parte por elementos nulos, esses blocos se referem a \mathbf{B}_i e \mathbf{B}_i^T apresentados em (3.3). Os elementos não nulos estarão concentrados na parte referente aos blocos \mathbf{A}_i e \mathbf{D}_i , conforme separação em blocos apresentada em (3.3).

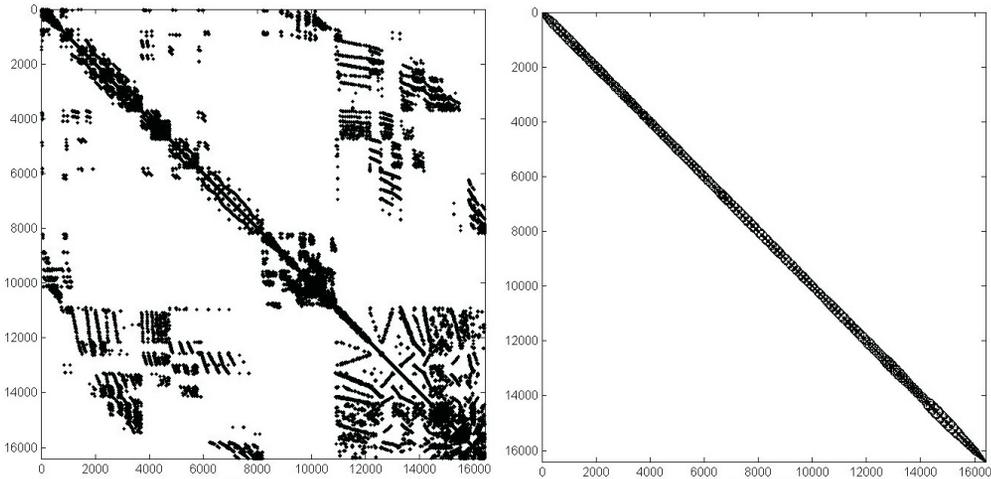


Figura 2: (a) Matriz de Hodge convencional. (b) Matriz de Hodge tratada pelo algoritmo de Cuthill-McKee.

Essa nova configuração da matriz de Hodge proporciona uma diminuição considerável no tempo de processamento para obtenção de sua inversa esparsa através da utilização da esparsificação recursiva. A seguir apresentamos alguns resultados numéricos que evidenciam essa observação.

6 RESULTADOS

O objetivo desta seção é expor os resultados obtidos a partir da utilização da esparsificação recursiva juntamente com o algoritmo de Cuthill-McKee na inversão das Matrizes de Hodge. Nela, compara-se o tempo de processamento computacional na aplicação da diagonalização de Cuthill-McKee com o método da Esparsificação Recursiva e é feita uma simulação de guia de onda retangular 2D.

6.1 Guia de onda retangular 2D

Considere o guia de onda retangular, cujas paredes na direção z são condutoras eletricamente perfeitas (PEC – perfect electric conductor) e cujo material interno é o ar.

O esquema Leap-frog [4] em termos de \mathbf{e} e \mathbf{b} para este problema será dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^{k+1} &= \mathbf{b}^k - \delta t \mathbf{G} \mathbf{e}^{k-1/2} \\ \mathbf{e}^{k+1/2} &= \mathbf{e}^{k-1/2} + \delta t \left[\mathbf{M}_0^{-1}(\epsilon) \mathbf{G}^T \mathbf{M}_1(\nu) \mathbf{b}^k \right] \end{aligned} \quad (6.1)$$

onde \mathbf{G} é a matriz de incidência nó-aresta e $\mathbf{M}_0(\epsilon)$ e $\mathbf{M}_1(\nu)$ são as matrizes de Galerkin-Hodge [5].

A Figura 3 apresenta a distribuição do campo elétrico na região central do guia ($x = a/2$) com 17.400 passos de tempo, em contraste com a solução analítica. Observe que a solução do método

com formas diferenciais é concordante com a solução analítica e, o campo é completamente absorvido pela camada PML.

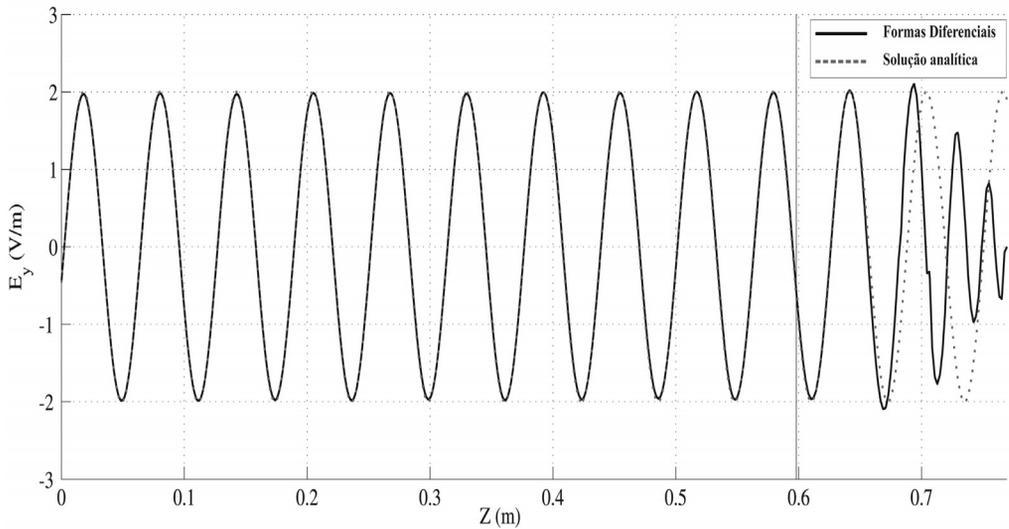


Figura 3: Campo elétrico E_y no meio do guia $x = a/2$ com 17.400 passos de tempo.

6.2 Tempo de Processamento

Para se mostrar a redução do tempo de processamento devido a aplicação da diagonalização de Cuthill-McKee, é fixado o parâmetro threshold em $r = 1 \times 10^{-5}$ e comparamos o tempo de processamento do método da esparsificação recursiva com e sem a aplicação da diagonalização da matriz, para matrizes de Hodge de ordem $n \times n$, com n variando entre 50.000 a 75.000.

Tabela 1: Tempo de Computação: Cuthill-McKee (CM) \times Esparsificação Recursiva(ER).

Tamanho da matriz n	CM (s)	ER (s)	Speedup CM/ER
50.000	17,58	28,85	0,6094
55.000	21,70	46,48	0,4667
60.000	29,27	76,99	0,3815
65.000	42,42	422,87	0,1003
70.000	396,41	1002,4	0,3955
75.000	853,08	1513,9	0,5635

A Tabela 1 mostra os resultados obtidos neste experimento, percebe-se uma redução significativa no tempo de processamento pela aplicação da diagonalização. Destacamos que para uma matriz de ordem 65.000×65.000 obtivemos um redução de 90% no tempo de processamento.

7 CONCLUSÃO

Neste trabalho pôde ser observado uma redução expressiva no tempo de processamento para o método da Esparsificação Recursiva com o uso do algoritmo de Cuthill-McKee. Este fato ocorre em decorrência da geração de blocos quase-nulos após a diagonalização da matriz proporcionando desta forma uma redução de operações a serem efetuadas.

ABSTRACT. The solution of sparse linear systems of high order is inserted in various branches of science, such as engineering. Consequently, there has been a great effort to resolve or provide approximate solutions of such systems efficiently. This work combines the method of recursive sparsification with the Cuthill-McKee algorithm for a sparse approximation to the inverse of a class of sparse matrices called Hodge's Matrices.

Keywords: recursive Sparsification, Hodge's matrices, Cuthill-McKee algorithm.

REFERÊNCIAS

- [1] A. Bossavit. "Computational Electromagnetism: Variational Formulation, Complementarity, Edge Elements", Academic Press, San Diego (1994).
- [2] A. George & J.W.H Liu. "Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems", Prentice-Hall (1981).
- [3] B. He & F.L. Teixeira. Geometric finite element discretization of Maxwell equations in primal and dual spaces. *Physics Letters A*, **349** (2006), 1–14, Elsevier.
- [4] J. Keranen, J. Kangas, A. Ahola & L. Kettunen. Implicit Yee-like scheme on tetrahedral mesh. *Magnetics, IEEE Transactions*, **32**(2) (2002), 717–720.
- [5] A.S. Moura, R.R. Saldanha, E.J. Silva, A.C. Lisboa, W.G. Facco & N.Z. Lima. A recursive sparsification of the inverse hodge matrix. *Magnetics, IEEE Transactions*, **48** (2012), 611–614.
- [6] A.S. Moura, R.R. Saldanha, E.J. Silva, A.C. Lisboa & W.G. Facco. Discretization of the CFS-PML for computational electromagnetics using discrete differential forms. *Microwave and Optical Technology Letters*, **55**(2) (2013), 351–357.
- [7] A. Quarteroni, R. Sacco & F. Saleri. Numerical Mathematics. *Texts in Applied Mathematics*, **37** (2007), Springer Berlin Heidelberg.