Разреженные матрицы

- Матричные задачи часто используются при решении разреженных линейных алгебраических уравнений; разреженных обычных и обобщенных спектральных задач и т.п., причем, матрицы при этом могут быть достаточно большие (> $\mathbf{10^{10-20}}$ элементов), а число ненулевых элементов при матрице порядка **n** может выражаться как: $\mathbf{n^{1+g}}$,
- где **g < 1**.
- При, g <= 0.2 или g <= 0.5, считаем, что матрица разрежена.
- Разреженность матрицы следует рассматривать только тогда, когда из ее разреженности имеет смысл извлекать выгоду при **не обработке** нулевых элементов.

Разреженную матрицу можно обрабатывать как плотную, и наоборот, плотную матрицу - как разреженную.

В обоих случаях получаются правильные числовые результаты, **но вычислительные затраты растут.**

Алгоритмы обработки разреженных матриц предусматривают действия только с **ненулевыми элементами**, т. о., число операций пропорционально числу ненулевых элементов. Отсюда следует, что имеет смысл хранить в памяти только ненулевые элементы.

Ленточные матрицы

- Матрица называется ***ленточной***, если в квадратной матрице, все ненулевые элементы заключены внутри ленты, образованной диагоналями, параллельными главной диагонали, т. о.,
- что $\mathbf{a_{ij} = 0}$, если > **β** и $\mathbf{a_{k,k-\beta} \neq 0}$
- Или $\mathbf{a_{k,k+\beta} \neq 0}$ хотя бы для одного значения **k**.
- Здесь **β** – полуширина, а $\mathbf{2 * \beta + 1}$ – ширина ленты.

- Если матрица ***симметрична***, то достаточно хранить ее нижнюю или верхнюю **полуленту**, т. е. **β** элементов в каждой строке.

- В этом случае используется **Диагональная схема хранения симметричных матриц**
- Она удобна, если $\mathbf{\beta << n}$
-

Диагональная схема хранения симметричных матриц:

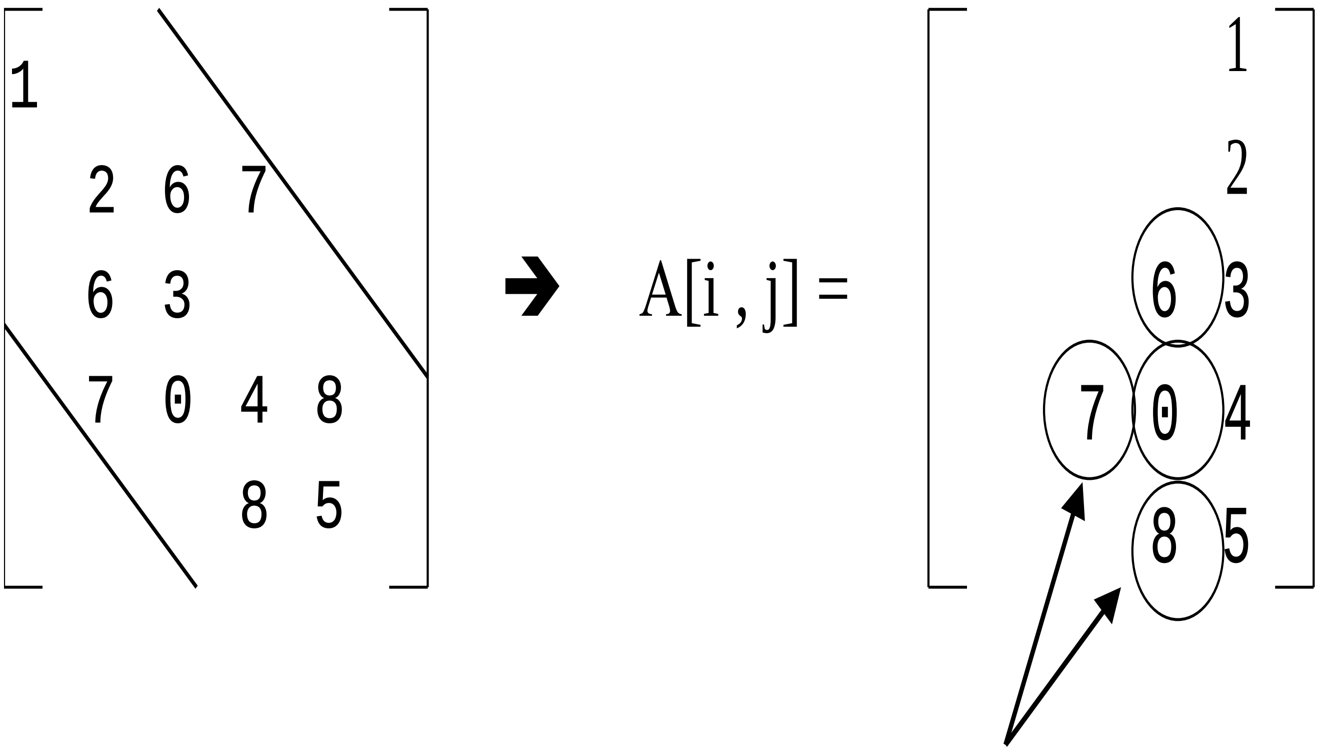


Рис.1. Элементы оболочки; Профиль = 4

Диагональная схема удобна, если **β << n**.

Важное свойство:

- *ширина ленты зависит от порядка расположения строк и столбцов в* ***ленточной*** матрице.
- Поэтому можно искать перестановки строк и столбцов, приводящие к уменьшению ширины ленты, что, в свою очередь, приводит к уменьшению запросов памяти и уменьшает работу.

Профильная схема хранения симметричных матриц:

- Более эффективная и простая схема хранения *симметричных* матриц, кот. называется ***профильной (оболочечной) схемой*** или ***схемой переменной ленты.(***1966г. **Дженнингс)**
- В этом случае. для каждой строки ширина ленты будет определяться: $\boldsymbol{\beta_i = i - j_{\min (i)}}$,
- где $\mathbf{j_{\min (i)}}$, – мин-ный столбцовый индекс строки **i**, для которой $\mathbf{a_{ij} \neq 0}$, тогда полуширина ленты равна $\mathbf{\max(\beta_i)}$.
- ***Оболочкой*** матрицы **A** будет **множество элементов** $\mathbf{a_{ij}}$, для которых выполняется неравенство: $\mathbf{0 < i - j \le \beta_i}$.
- ***Профиль*** **матрицы A** – это **число элементов в ее оболочке:**

- $$\text{profile}(A) = \sum_{i}^{n} \beta_i$$

- При использовании схемы Дженнингса все элементы оболочки, упорядоченные по возрастанию **j** в строках, включая нули, хранятся в одномерном массиве, например, **AN**. При этом диагональный элемент строки помещается в ее конец. Длина массива **AN** равна сумме профиля и порядка матрицы **A**. Необходим еще массив указателей (номеров), например, **IA,** элементы кот. есть указатели (номера) расположения диагональных элементов в **AN**.
- Пример: (см. рис.1) Профиль матрицы равен 4, т.е., элементов всего 4,
- + диагональные (5). Итого 9 элементов.

- Если **a_{11}**– первый элемент в записи, тогда:

Позиция:	1	2	3	4	5	6	7	8	9
• AN:	1	2	6	3	7	0	4	8	5

диагональные элементы

- IA : 1 2 4 7 9 - позиции диагональных элементов в AN

- Т. о., элементы имеют последовательные, легко вычисляемые индексы столбцов.
- Если матрица не сильно разрежена, то объем доп. памяти при таком хранении будет > объема памяти при обычном хранении матрицы. Схема переменной ленты **строчно-ориентирована.** Кр. того, она - статическая, т. к. включение нового элемента, лежащего **вне** оболочки, требует изменения всей структуры (если только не используются записи переменной длины).

Связные схемы разреженного хранения

- При профильном хранении нули внутри ленты хранятся и + еще доп. память под **IA** (***накладная)***. Можно предложить другую схему хранения, если нули рассеяны по всей матрице.
- Считаем, что матрица большая, то есть, в ней больше 1000 элементов.
- Например,
-
- A= $\begin{bmatrix} & 3. & & \\ 4. & 7. & 8. & \\ & -5. & & 11. \\ & 1. & & \end{bmatrix}$ - это портрет матрицы или шаблон нулей – не нулей
-
-

Схема хранения матриц (Кнут 1968г.)

1. сами элементы в произвольном порядке **(a_{ij});**
2. строчные индексы элементов **(i);**
3. столбцовые индексы элементов **(j);**
4. номер следующего ненулевого элемента строки;
5. номер следующего ненулевого элемента столбца;
6. указатель (номера эл-тов) для входа строк;
7. указатель (номера эл-тов) для входа столбцов;

- Тогда для матрицы A, указанной выше, имеем:

	1	2	3	4	5	6	7	
1. **AN** =	3.	4.	7.	8.	-5.	11.	1.	*- элементы*
2. **I** =	1	2	2	2	3	3	4	*- их строки*
3. **J** =	2	1	2	3	2	4	2	*- их столбцы*
4. **NR** =	0	3	4	0	6	0	0	- *номер следующего элемента в строке (Next Row)*
5. **NC** =	3	0	5	0	7	0	0	*- номер след. элемента в столбце (Next Column)*
6. **JR** =	1	2	5	7				*– номера элементов (в **AN**), с которых начинается строка*
7. **JC** =	2	1	4	6				*- номера элементов (в **AN**), с которых начинается столбец*

- Элемент при известных индексах легко найти, т.к. кол-во и положение элементов в массивах 1 – 5 соответствуют друг другу.
- Т. о., можно найти все элементы столбца, например, столбца 2:
- JC[2] = 1 – первый элемент
- AN[1] = **3.** – сам элемент
- I [1] = 1 – то есть - первая строка
- NC[1] = 3 – следующий элемент ➔ 3
- AN[3] = **7.** ➔ I[3] ➔ 2 – то есть - вторая строка
- NC[3] = 5 – следующий элемент ➔ 5
- AN[5] = **-5.** ➔ I[5] ➔ 3 – т.е. - третья строка
- NC[5] = 7 – следующий элемент ➔ 7
- AN[7] = **1.** ➔ I[7] ➔ 4 – т.е. - четвертая строка
- NC[7] = 0, то есть, больше элементов нет
- Вообще, если **JC[I]** = 0, то **i**-ый столбец пуст.

- Элемент a_{ij} можно найти, входя в список с первой строки. Обратная задача, если задано **k**, то **AN[k], I[k], J[k].**
- **Достоинство -** в любом месте можно включать или исключать элементы и можно эффективно сканировать строки и столбцы. Схема идеальна, когда матрица строится таким алгоритмом, где нельзя предсказать конечное число и позиции ненулевых элементов.
- **Недостаток**: для хранения требуется достаточно большая **<u>накладная</u>** память

КРМ схема

- **Рейнболдт** и **Местеньи** (1973г.) предложили модификацию схемы Кнута, уменьшающую накладную память. Она получила название ***КРМ (кольцевой) схемы.*** В этой схеме связные списки строк и столбцов «закольцовываются», а начальные позиции списков включаются в указатели входа. Списки, ассоциированные со строками (столбцами), попарно не пересекаются, поэтому м. б. **совместно** хранимы одним массивом **NR** (т.е. **I** и **NR** хранится в **NR**) (для столбцов – массивом **NC,** т.е.**J+NC**). Эта схема более плотная, чем сх. Кнута, но, если приходится просматривать элементы некоторой строки (или столбца), то мы не получим никакой информации о столбцовых (строчных) индексах этих элементов.

$$
A = \begin{array}{c}
\begin{array}{cccc} 1 & 2 & 3 & 4 \end{array} \\
\begin{bmatrix}
 & 6. & & \\
9. & 4. & & 7. \\
5. & & & \\
 & 2. & & 8.
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

Кольцевая КРМ схема:

	1	2	3	4	5	6	7
AN =	**6.**	**9.**	**4.**	**7.**	**5.**	**2.**	**8.**
I	1	2	2	2	3	4	4
NR =	0 1	3	4	0 2	0 3	7	0 4
J	2	1	2	4	1	2	4
NC =	3	5	6	7	0 1	0 2	0 4

JR = 1 2 5 6 - Номер элемента в AN, с которого начинается строка

JC = 2 1 0 4 – Номер элемента в AN, с которого начинается столбец

- Рассмотрим, как можно найти $\mathbf{a_{ij}}$**:** (допустим, $\mathbf{a_{2,4}}$)
- сначала сканируется **i-я** строка, при этом определяется множество **Si** позиций элементов этой строки в массиве AN.
- Т. Е., S**i** = {p | AN(P) есть элемент i-ой строки}
- S**2**➔JR[2]➔2; NR[2]➔3, NR[3]➔4, NR[4]➔2 (кольцо), то есть, элементы:
- AN[2]➔**9.**, AN[3]➔**4.**, AN[4]➔**7.**

- Подразумевается, что повторения отсутствуют, т. е., каждой паре **p,q** строчного и столбцового индексов соответствует самое большее одна позиция в каждом из массивов AN, NR, NC. Далее сканируем j-ый столбец и получаем аналогично:
- S**j** = S**4**➔JC[4]➔4; NC[4]➔7, NC[7]➔4, то есть,кольцо
- т.о. элементы: AN[4]➔**7.**, AN[7]➔**8.**
- Пересечение **Sj** и **Si** даст сам элемент, то есть, S**j** **^** S**i**
- S**i** = AN[4]➔7, $\mathbf{a_{2,4} = 7.}$
- Обратная задача, то есть, по заданной позиции **k** в AN найти соответствующие индексы **i** и **j** не имеет другого решения как просмотр всей матрицы.

вариант КРМ схемы, для нахождения нужных индексов

- Здесь указатели входа для строк и столбцов по существу включаются в соответствующие кольцевые списки.
- Один из способов такого включения:

отрицательные числа для ссылок на указатели строк и столбцов. Тогда просматриваем ряд (строку или столбец) до тех пор, пока не будет найден отрицательный элемент (ссылка), абсолютная величина кот. есть номер ряда.

- В то же время схема отсылает к соответствующему указателю входа, так что просмотр ряда при необходимости может продолжаться.

Поиск строчного индекса элемента AN(3)

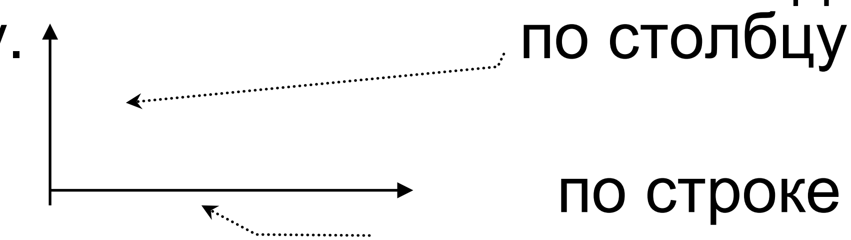
	1	2	3	4	5	6	7
AN =	6.	9.	4.	7.	5.	2.	8.
						-индекс строки	
NR =	-1	3	4	-2	-3	7	-4
NC =	3	5	6	7	-1	-2	-4
JR =	1	2	5	6			
JC =	2	1	0	4			

- Так как NR[3] = 4 и NR[4] = -2, то индекс i = 2;
- Кр. того, JR[2]→2, а AN[2]→3, т.е., опять же i = 2.

- Чтобы найти в массиве AN элемент a_{ij}, можно сделать, как описано выше, а можно еще рассмотреть **i**-ю строку и найти столбцовый индекс каждого элемента, сканируя соответствующие столбцовые списки, пока не встретится **j.**

вперед по строке, назад по столбцу

- **Лакрум** в 1971г. использовал еще один вариант схемы Кнута для хранения ***симметричных положительно определенных матриц***, содержавших числа или подматрицы.
- Хранится только диагональ и верхний треугольник матрицы. Нужен только один массив указателей входа, которые отсылают нас к диагональным элементам.
- А от <u>каждого</u> диагонального элемента начинаются два списка: по строке и по столбцу.

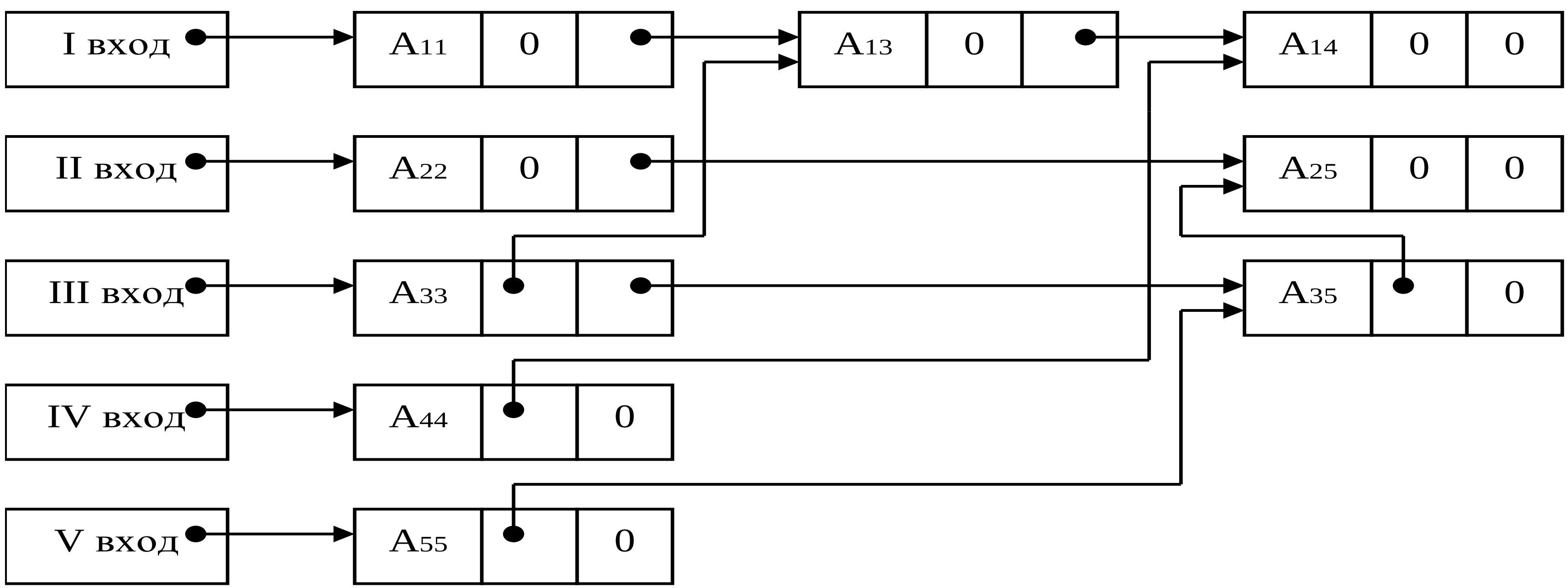


- Идею схемы легко распространить на матрицу общего вида, **если существует диагональ *ненулевых* элементов** (так называемая ***трансверсаль***), то от каждого элемента может начинаться уже не 2, а 4 списка с соответствующими значениями строк и столбцов.

вперед по строке, назад по столбцу

Например:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & & a_{13} & a_{14} & \\ & a_{22} & & & a_{25} \\ & & a_{33} & & a_{35} \\ & & & a_{44} & \\ & & & & a_{55} \end{bmatrix}$$



Разреженный строчный формат

- Схема хранения разреженных матриц,(**Чанг** (1969г.) и **Густавсон** (1972г.)) – это ***разреженный строчный формат*** – предъявляет **минимальные** требования к памяти и очень удобна при выполнении операций сложения, умножения матриц, перестановок строк и столбцов, транспонировании, решении систем линейных уравнений при хранении коэффициентов в разреженных матрицах и т. п.

- Значения ненулевых элементов хранятся в массиве **AN**, соответствующие им стобцовые индексы – в массиве **JA**. Кроме того, используется массив указателей (номеров), например, **IA**, отмечающих позиции **AN** и **JA**, с которых начинаются описание очередной строки. Дополнительная компонента в **IA** содержит указатель (номер) первой свободной позиции в **JA** и **AN.**

- Например, портрет:

A =

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1			1.	4.				5.		
2										
3						7.		11.		

представляется так:

	1	2	3	4	5	6	
AN	**1.**	**4.**	**5.**	**7.**	**11.**		- элементы;
JA	3	4	8	6	8		- соответств.номера столбцов;
IA	1	4	4	6			- с какого элемента начинается описание строки;

- например, 4 4 – указывает на то, что во второй строке элементов нет,
- 6 – свободная позиция в JA и AN, т. е., элементов в них 5.
- Фактически, JA и AN дают портрет матрицы. Это представление матриц называют ***полным***, т. к. представлены все ненулевые элементы, и ***упорядоченным***, т. к. элементы каждой строки <u>упорядочены по возрастанию индексов столбцов</u>
- (Row-Wise Representation complete and Ordered
- ➔ RR(C)O).

- Неупорядоченное строчное представление, например, такое:

	1	2	3	4	5
AN	**5.**	**1.**	**4.**	**11.**	**7.**
JA	8	3	4	8	6
IA	1	4	4	6	

- Это Row-Wise Representation complete and Unordered ➔ RR(C)U – представление.
- (№№ строк- упорядочены, описание элементов строки - нет)
- Удобно, т.к. результаты большинства матричных операций - неупорядочены, а упорядочивание увеличивает затраты машинного времени.
- Аналогично можно хранить номера строк и список (номера) вхождений в столбец.

- Операции над матрицами

Сложение разреженных векторов

- ***<u>Разреженный вектор</u>*** – это ***<u>разреженная матрица-строка или матрица-столбец.</u>***
- Предыдущая схема - **упакована**, т. к. хранятся только ненулевые элементы. Для алгебраических операций удобно во время работы хранить не только полный (расширенный) вектор элементов, но еще хранить и массив JA, чтобы работать только с **ненулевыми** элементами, таким образом, сокращая перебор всех элементов вектора. **Для сложение** разреженных векторов используют ***расширенный накопитель.***

- Например, есть два разреженных вектора:
- **a** и **b** размером N (у нас - 12)

J индекс	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**11**	**12**
a			**0.3**	**-0.7**			**0.4**			**0.2**		
b				**0.7**	**0.6**					**0.5**		

Их представление будет:

$$\left.\begin{array}{lllll} JA & 10 & 3 & 7 & 4 \\ AN & 0.2 & 0.3 & 0.4 & -0.7 \end{array}\right\} a$$

$$\left.\begin{array}{llll} JB & 5 & 4 & 10 \\ BN & 0.6 & 0.7 & 0.5 \end{array}\right\} b$$

При обычном сложении необходим просмотр **всех элементов** JA и JB, сложность - **Q(n),** где **n =** количеству элементов обоих массивов - неэффективно, при разреженности.

- Для эффективной процедуры сложения разбиваем алгоритм на две части:
- т. н. ***символическая*** часть, где осуществляется распределение памяти под результат;
- ***численная*** часть, где осуществляется численная обработка, т. е., реальные вычисления.
- В этом случае общее число элементарных операций будет **<u>линейной</u>** функцией от общего числа **ненулевых** элементов.

- ***Символический этап*** определяет позиции ненулевых элементов путем ***слияния списков (индексов) JA и JB*** с помощью ***расширенного массива переключателей***, кот. используется для формирования столбцовых индексов в разреженных матрицах и осуществляет процесс слияния списков.

- Массив переключателей IX указывает, был ли элемент задействован в списках JA и JB. Вначале IX нулевой.
- Т.О. есть 2 списка:
- Список (массив) **JA** : 10 3 7 4
- Список (массив) **JB** : 5 4 10
-

  Позиции ненулевых эл-тов:
- Позиции 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 . . . N
- значения **IX** 0 0 1 1 1 0 1 0 0 1 до max в (JA JB)
- из списка (массива) **JA** – в список **JC**:
- Список (массив) **JC** : 10 3 7 4
- Проверяем теперь список **JB**, предварительно сверив по **IX** нужно ли вписывать число в **JC**.
- В результате **JC** : 10 3 7 4 5
- Т. е. – это множество значений в списках (объединение списков).

- Теперь используем **расширенный вещественный накопитель** X размерности N, во все ненулевые позиции которого (используя JC) зашлем 0:
- позиция 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 ...
- Значение **X** x x **0.** **0.** **0.** x **0.** x x **0.** x x ...
  - Загружаем AN в X:
- 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 ...
- **X** x x **0.3** **-0.7** **0.** x **0.4** x x **0.2** x x ...
  - Теперь прибавляем BN:
- 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 ...
- **X** x x **0.3** **0.** **0.6** x **0.4** x x **0.7** x x ...
- Теперь выбираем из X нужные числа для формирования CN:
- JC 10 3 7 4 5
- CN **0.7** **0.3** **0.4** **0.** **0.6**
- Количество операций пропорционально числу ненулевых элементов, не считая засылки N (maxN из Ja и Jb) нулей в массив IX.

- **Скалярное умножение** двух разреженных векторов с использованием ***массива указателей (номеров)***

- Допустим, два разреженных вектора размером N хранятся в массивах JA, AN и JB, BN.
- Оба представления компактные и неупорядоченные. Надо вычислить скалярное произведение этих векторов:
-
- $$h = \sum_{i=1}^{N} a_i b_i$$

- Алгоритм следующий:
- Для хранения указателей позиций ненулевых элементов в **AN** используется расширенный массив указателей **IP**, который заполняется путем одного просмотра массива **JA** (его начальное состояние – нулевое).
- На том же примере: номер индекса в **JA**

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	...
IP	0	0	2	4	0	0	3	0	0	1	0	

- номер элемента в **AN**

- Отсюда видно, что **a3** хранится в AN (2).
- Далее просматриваются массивы JB и BN и если позиции ненулевых элементов совпадают, то вычисляем **ai * bi** и накапливаем в **h** до тех пор, пока не будет исчерпан JB.
- У нас: JB(1) = 5, IP(5) = 0 – действий нет;
- JB(2) = 4, IP(4) = 4 ,
- следоват. смотрим ➔ AN**(4)** = -0.7, а BN**(2)** = 0.7,
- и умножаем ➔ BN**(2)** * AN**(4)** = -0.49
- Применение этого алгоритма особенно интересно в ситуации, когда вектор **a** нужно скалярно умножить на несколько векторов. В этом случае массив **IP** заполняется только один раз и затем используется для вычисления всех требуемых скалярных произведений. Эта ситуация возникает при необходимости перемножить разреженную матрицу и разреженный вектор.

- Задача №3   Обработка разреженных матриц
-
- **Цель работы: реализация алгоритмов обработки разреженных матриц, сравнение этих алгоритмов со стандартными алгоритмами обработки матриц при различном размере матриц и степени их разреженности.**
-
- Разреженная (содержащая много нулей) матрица хранится в форме 3-х объектов:
-     - вектор ***A*** содержит значения ненулевых элементов;
-     - вектор ***JA*** содержит номера столбцов для элементов вектора ***A***;
-     - связный список ***IA***, в элементе Nk которого находится номер компонент
- в ***A*** и ***JA***, с которых начинается описание строки Nk матрицы ***A***.
-
- 1. Смоделировать операцию обработки двух матриц, хранящихся в этой форме, с получением результата в той же форме.
- 2. Произвести операцию обработки, применяя стандартный алгоритм работы с матрицами.
- 3. Сравнить время выполнения операций и объем памяти при использовании этих 2-х алгоритмов при различном размере матриц и различном проценте заполнения матриц.
-