

# Введение в разреженную линейная алгебру

Даня Меркулов

МФТИ. AI360

## Введение в разреженные матрицы

# Что такое разреженная матрица?

Матрица называется **разреженной** (sparse), если большинство её элементов равны нулю. Точного порога нет, но обычно имеется в виду, что число ненулевых элементов (nnz) **значительно меньше** общего числа элементов ( $m \times n$ ).

$$\text{nnz} \ll m \times n$$

# Что такое разреженная матрица?

Матрица называется **разреженной** (sparse), если большинство её элементов равны нулю. Точного порога нет, но обычно имеется в виду, что число ненулевых элементов (nnz) **значительно меньше** общего числа элементов ( $m \times n$ ).

$$\text{nnz} \ll m \times n$$

## Зачем они нужны?

- **Экономия памяти:** Хранение только ненулевых элементов позволяет работать с матрицами огромных размеров, которые не поместились бы в память в плотном виде.

# Что такое разреженная матрица?

Матрица называется **разреженной** (sparse), если большинство её элементов равны нулю. Точного порога нет, но обычно имеется в виду, что число ненулевых элементов (nnz) **значительно меньше** общего числа элементов ( $m \times n$ ).

$$\text{nnz} \ll m \times n$$

## Зачем они нужны?

- **Экономия памяти:** Хранение только ненулевых элементов позволяет работать с матрицами огромных размеров, которые не поместились бы в память в плотном виде.
- **Ускорение вычислений:** Операции (умножение на вектор, решение СЛАУ) можно выполнять быстрее, пропуская операции с нулевыми элементами.

# Где встречаются разреженные матрицы?

Разреженные матрицы возникают естественным образом во многих областях:

- **Дискретизация дифференциальных уравнений:** Например, при решении уравнения Лапласа методом конечных разностей или конечных элементов матрица системы получается ленточной или блочно-ленточной.

# Где встречаются разреженные матрицы?

Разреженные матрицы возникают естественным образом во многих областях:

- **Дискретизация дифференциальных уравнений:** Например, при решении уравнения Лапласа методом конечных разностей или конечных элементов матрица системы получается ленточной или блочно-ленточной.
- **Анализ графов:** Матрица смежности графа (например, социальной сети или веб-графа) обычно разрежена, так как каждый узел связан лишь с небольшим числом других узлов.

# Где встречаются разреженные матрицы?

Разреженные матрицы возникают естественным образом во многих областях:

- **Дискретизация дифференциальных уравнений:** Например, при решении уравнения Лапласа методом конечных разностей или конечных элементов матрица системы получается ленточной или блочно-ленточной.
- **Анализ графов:** Матрица смежности графа (например, социальной сети или веб-графа) обычно разрежена, так как каждый узел связан лишь с небольшим числом других узлов.
- **Машинное обучение:** Например, в рекомендательных системах (матрица ``пользователь-товар``) или при прореживании (pruning) нейронных сетей.



# Где встречаются разреженные матрицы?

Разреженные матрицы возникают естественным образом во многих областях:

- **Дискретизация дифференциальных уравнений:** Например, при решении уравнения Лапласа методом конечных разностей или конечных элементов матрица системы получается ленточной или блочно-ленточной.
- **Анализ графов:** Матрица смежности графа (например, социальной сети или веб-графа) обычно разрежена, так как каждый узел связан лишь с небольшим числом других узлов.
- **Машинное обучение:** Например, в рекомендательных системах (матрица ``пользователь-товар``) или при прореживании (pruning) нейронных сетей.
- **Научные вычисления:** Моделирование физических процессов, схемы электроники и т.д.

## Форматы хранения разреженных матриц

## Coordinate Format (COO)

Хранить все нули неэффективно. Существуют специальные форматы для хранения только ненулевых элементов и их позиций.

Самый простой формат: храним три массива одинаковой длины (nnz):

- row: массив номеров строк для каждого ненулевого элемента.

# Coordinate Format (COO)

Хранить все нули неэффективно. Существуют специальные форматы для хранения только ненулевых элементов и их позиций.

Самый простой формат: храним три массива одинаковой длины (nnz):

- `row`: массив номеров строк для каждого ненулевого элемента.
- `col`: массив номеров столбцов.

# Coordinate Format (COO)

Хранить все нули неэффективно. Существуют специальные форматы для хранения только ненулевых элементов и их позиций.

Самый простой формат: храним три массива одинаковой длины (nnz):

- `row`: массив номеров строк для каждого ненулевого элемента.
- `col`: массив номеров столбцов.
- `data`: массив значений ненулевых элементов.

# Coordinate Format (COO)

Хранить все нули неэффективно. Существуют специальные форматы для хранения только ненулевых элементов и их позиций.

Самый простой формат: храним три массива одинаковой длины (nnz):

- `row`: массив номеров строк для каждого ненулевого элемента.
- `col`: массив номеров столбцов.
- `data`: массив значений ненулевых элементов.

# Coordinate Format (COO)

Хранить все нули неэффективно. Существуют специальные форматы для хранения только ненулевых элементов и их позиций.

Самый простой формат: храним три массива одинаковой длины (nnz):

- `row`: массив номеров строк для каждого ненулевого элемента.
- `col`: массив номеров столбцов.
- `data`: массив значений ненулевых элементов.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

# Coordinate Format (COO)

Хранить все нули неэффективно. Существуют специальные форматы для хранения только ненулевых элементов и их позиций.

Самый простой формат: храним три массива одинаковой длины (nnz):

- `row`: массив номеров строк для каждого ненулевого элемента.
- `col`: массив номеров столбцов.
- `data`: массив значений ненулевых элементов.

Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате COO:

```
row = [0, 0, 1, 2, 2]
col = [0, 3, 1, 0, 2]
data = [1, 2, 3, 4, 5]
```



# Coordinate Format (COO)

Хранить все нули неэффективно. Существуют специальные форматы для хранения только ненулевых элементов и их позиций.

Самый простой формат: храним три массива одинаковой длины (nnz):

- `row`: массив номеров строк для каждого ненулевого элемента.
- `col`: массив номеров столбцов.
- `data`: массив значений ненулевых элементов.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате COO:

```
row = [0, 0, 1, 2, 2]
col = [0, 3, 1, 0, 2]
data = [1, 2, 3, 4, 5]
```

**Плюсы:** - Простота и легкость добавления новых элементов.

**Минусы:** - Неэффективен для арифметических операций (например, умножения на вектор). - Избыточное хранение индексов строк (могут повторяться).

## List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).

## List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

## List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

## List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

# List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

```
rows = [  
    [(0, 1), (3, 2)], # Строка 0  
    [(1, 3)],         # Строка 1  
    [(0, 4), (2, 5)]  # Строка 2  
]
```

# List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

```
rows = [  
    [(0, 1), (3, 2)], # Строка 0  
    [(1, 3)],        # Строка 1  
    [(0, 4), (2, 5)] # Строка 2  
]
```

**Плюсы:**

- Удобно добавлять/удалять элементы и изменять структуру матрицы.

**Минусы:**

# List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

```
rows = [  
    [(0, 1), (3, 2)], # Строка 0  
    [(1, 3)],        # Строка 1  
    [(0, 4), (2, 5)] # Строка 2  
]
```

**Плюсы:**

- Удобно добавлять/удалять элементы и изменять структуру матрицы.
- Эффективен для построения матрицы по элементам.

**Минусы:**



# List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

```
rows = [  
    [(0, 1), (3, 2)], # Строка 0  
    [(1, 3)],         # Строка 1  
    [(0, 4), (2, 5)]  # Строка 2  
]
```

**Плюсы:**

- Удобно добавлять/удалять элементы и изменять структуру матрицы.
- Эффективен для построения матрицы по элементам.

**Минусы:**

- Неэффективен для арифметических операций.

# List of Lists (LIL)

Представление в виде списка списков:

- Внешний список длины  $m$  (число строк).
- Каждый элемент `rows[i]` - это список пар (индекс\_столбца, значение) для ненулевых элементов  $i$ -й строки.

Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

```
rows = [  
    [(0, 1), (3, 2)], # Строка 0  
    [(1, 3)],         # Строка 1  
    [(0, 4), (2, 5)]  # Строка 2  
]
```

Плюсы:

- Удобно добавлять/удалять элементы и изменять структуру матрицы.
- Эффективен для построения матрицы по элементам.

Минусы:

- Неэффективен для арифметических операций.
- Потребляет больше памяти, чем COO или CSR из-за списков Python.

## Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате CSR:

```
data      = [1, 2, 3, 4, 5]   # Ненулевые элементы по строкам
indices   = [0, 3, 1, 0, 2]   # Номера столбцов для них
indptr    = [0, 2, 3, 5]     # Указатели: строка 0 начинается
                              # с индекса 0, строка 1 с 2,
                              # строка 2 с 3, конец - индекс 5
```



# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

**Пример:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате CSR:

```
data      = [1, 2, 3, 4, 5]  # Ненулевые элементы по строкам
indices   = [0, 3, 1, 0, 2]  # Номера столбцов для них
indptr    = [0, 2, 3, 5]    # Указатели: строка 0 начинается
                             # с индекса 0, строка 1 с 2,
                             # строка 2 с 3, конец - индекс 5
```

**Плюсы:**

- Эффективное хранение ( $2 \cdot nnz + m + 1$  чисел).

**Минусы:**

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина  $\text{nnz}$ ), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина  $\text{nnz}$ ).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате CSR:

```
data      = [1, 2, 3, 4, 5]  # Ненулевые элементы по строкам
indices   = [0, 3, 1, 0, 2]  # Номера столбцов для них
indptr    = [0, 2, 3, 5]    # Указатели: строка 0 начинается
                             # с индекса 0, строка 1 с 2,
                             # строка 2 с 3, конец - индекс 5
```

Плюсы:

- Эффективное хранение ( $2 \cdot \text{nnz} + m + 1$  чисел).
- Быстрое умножение матрицы на вектор (SpMV).

Минусы:

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина  $\text{nnz}$ ), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина  $\text{nnz}$ ).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате CSR:

```
data      = [1, 2, 3, 4, 5]  # Ненулевые элементы по строкам
indices   = [0, 3, 1, 0, 2]  # Номера столбцов для них
indptr    = [0, 2, 3, 5]    # Указатели: строка 0 начинается
                             # с индекса 0, строка 1 с 2,
                             # строка 2 с 3, конец - индекс 5
```

Плюсы:

- Эффективное хранение ( $2 \cdot \text{nnz} + m + 1$  чисел).
- **Быстрое умножение матрицы на вектор (SpMV).**
- Быстрый доступ к строкам.

Минусы:

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате CSR:

```
data      = [1, 2, 3, 4, 5]  # Ненулевые элементы по строкам
indices   = [0, 3, 1, 0, 2]  # Номера столбцов для них
indptr    = [0, 2, 3, 5]    # Указатели: строка 0 начинается
                             # с индекса 0, строка 1 с 2,
                             # строка 2 с 3, конец - индекс 5
```

Плюсы:

- Эффективное хранение ( $2 \cdot \text{nnz} + m + 1$  чисел).
- **Быстрое умножение матрицы на вектор (SpMV).**
- Быстрый доступ к строкам.

Минусы:

- Медленное добавление/удаление элементов (требует сдвигов в `data` и `indices`).

# Compressed Sparse Row (CSR)

Один из самых популярных и эффективных форматов для вычислений. Хранит 3 массива:

- `data`: значения ненулевых элементов (длина `nnz`), упорядоченные по строкам.
- `indices`: номера столбцов для каждого элемента в `data` (длина `nnz`).
- `indptr` (index pointer): массив длины  $m + 1$ . `indptr[i]` указывает на начало  $i$ -й строки в массивах `data` и `indices`. `indptr[i+1] - indptr[i]` - это количество ненулевых элементов в  $i$ -й строке. `indptr[m] = nnz`.

Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

В формате CSR:

```
data      = [1, 2, 3, 4, 5]  # Ненулевые элементы по строкам
indices   = [0, 3, 1, 0, 2]  # Номера столбцов для них
indptr    = [0, 2, 3, 5]    # Указатели: строка 0 начинается
                             # с индекса 0, строка 1 с 2,
                             # строка 2 с 3, конец - индекс 5
```

Плюсы:

- Эффективное хранение ( $2 \cdot nnz + m + 1$  чисел).
- **Быстрое умножение матрицы на вектор (SpMV).**
- Быстрый доступ к строкам.

Минусы:

- Медленное добавление/удаление элементов (требует сдвигов в `data` и `indices`).
- Медленный доступ к столбцам.

# Compressed Sparse Column (CSC)

Аналогичен CSR, но хранит матрицу по столбцам.

- data: значения ненулевых элементов, упорядоченные по столбцам.

# Compressed Sparse Column (CSC)

Аналогичен CSR, но хранит матрицу по столбцам.

- `data`: значения ненулевых элементов, упорядоченные по столбцам.
- `indices`: номера строк для каждого элемента в `data`.

# Compressed Sparse Column (CSC)

Аналогичен CSR, но хранит матрицу по столбцам.

- `data`: значения ненулевых элементов, упорядоченные по столбцам.
- `indices`: номера строк для каждого элемента в `data`.
- `indptr`: массив длины  $n + 1$ . `indptr[j]` указывает на начало  $j$ -го столбца.



# Compressed Sparse Column (CSC)

Аналогичен CSR, но хранит матрицу по столбцам.

- `data`: значения ненулевых элементов, упорядоченные по столбцам.
- `indices`: номера строк для каждого элемента в `data`.
- `indptr`: массив длины  $n + 1$ . `indptr[j]` указывает на начало  $j$ -го столбца.

# Compressed Sparse Column (CSC)

Аналогичен CSR, но хранит матрицу по столбцам.

- `data`: значения ненулевых элементов, упорядоченные по столбцам.
- `indices`: номера строк для каждого элемента в `data`.
- `indptr`: массив длины  $n + 1$ . `indptr[j]` указывает на начало  $j$ -го столбца.

**Плюсы:** - Эффективное хранение. - Быстрое умножение транспонированной матрицы на вектор ( $A^T x$ ). - Быстрый доступ к столбцам.

**Минусы:** - Медленное добавление/удаление элементов. - Медленный доступ к строкам.

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]
2. **indices:** Записываем столбцы для этих элементов: [1, 0, 2, 3, 0, 2]

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]
2. **indices:** Записываем столбцы для этих элементов: [1, 0, 2, 3, 0, 2]
3. **indptr:** Указатели на начало строк (и конец последней):

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]
2. **indices:** Записываем столбцы для этих элементов: [1, 0, 2, 3, 0, 2]
3. **indptr:** Указатели на начало строк (и конец последней):
  - Строка 0: начинается с индекса 0 (1 элемент: 7)

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]
2. **indices:** Записываем столбцы для этих элементов: [1, 0, 2, 3, 0, 2]
3. **indptr:** Указатели на начало строк (и конец последней):
  - Строка 0: начинается с индекса 0 (1 элемент: 7)
  - Строка 1: начинается с индекса 1 (2 элемента: 5, 1)



## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]
2. **indices:** Записываем столбцы для этих элементов: [1, 0, 2, 3, 0, 2]
3. **indptr:** Указатели на начало строк (и конец последней):
  - Строка 0: начинается с индекса 0 (1 элемент: 7)
  - Строка 1: начинается с индекса 1 (2 элемента: 5, 1)
  - Строка 2: начинается с индекса 3 (1 элемент: 9)

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]
2. **indices:** Записываем столбцы для этих элементов: [1, 0, 2, 3, 0, 2]
3. **indptr:** Указатели на начало строк (и конец последней):
  - Строка 0: начинается с индекса 0 (1 элемент: 7)
  - Строка 1: начинается с индекса 1 (2 элемента: 5, 1)
  - Строка 2: начинается с индекса 3 (1 элемент: 9)
  - Строка 3: начинается с индекса 4 (2 элемента: 8, 2)

## Упражнение: Преобразование в CSR

💡 Преобразуйте следующую матрицу в формат CSR вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите массивы `data`, `indices` и `indptr`.

Решение:

1. **data:** Записываем ненулевые элементы по строкам: [7, 5, 1, 9, 8, 2]
2. **indices:** Записываем столбцы для этих элементов: [1, 0, 2, 3, 0, 2]
3. **indptr:** Указатели на начало строк (и конец последней):
  - Строка 0: начинается с индекса 0 (1 элемент: 7)
  - Строка 1: начинается с индекса 1 (2 элемента: 5, 1)
  - Строка 2: начинается с индекса 3 (1 элемент: 9)
  - Строка 3: начинается с индекса 4 (2 элемента: 8, 2)
  - Конец: индекс 6 (всего 6 ненулевых элементов) Итого: [0, 1, 3, 4, 6]

Пример:

## Базовые операции с разреженными матрицами

## Умножение матрицы на вектор (SpMV)

Это ключевая операция для многих алгоритмов (например, итерационных методов решения СЛАУ). В формате CSR она выполняется эффективно.

```
# A - матрица в CSR (массивы ia, ja, sa)
# x - вектор для умножения
# y - результирующий вектор (инициализирован нулями)
n = len(ia) - 1
for i in range(n):
    # y[i] = 0 # Если не инициализирован нулями
    for k in range(ia[i], ia[i+1]):
        # Доступ к элементам i-й строки
        # sa[k] - значение элемента
        # ja[k] - номер столбца
        y[i] += sa[k] * x[ja[k]]
```

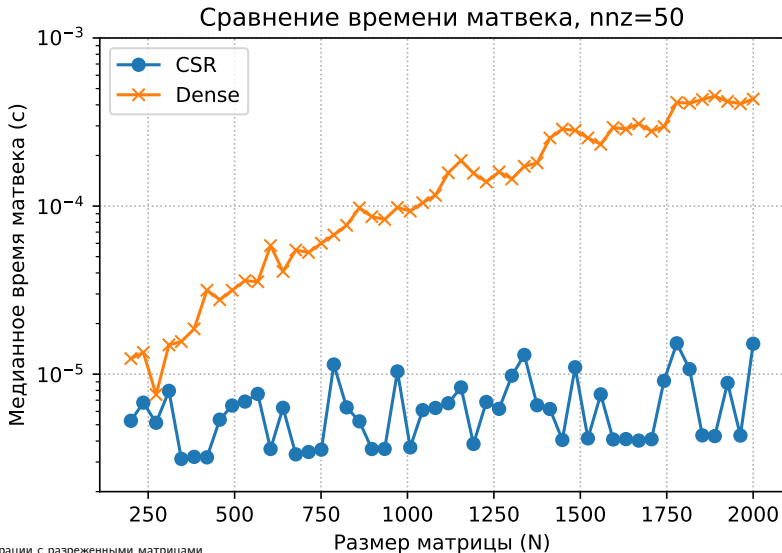
## Умножение матрицы на вектор (SpMV)

Это ключевая операция для многих алгоритмов (например, итерационных методов решения СЛАУ). В формате CSR она выполняется эффективно.

```
# A - матрица в CSR (массивы ia, ja, sa)
# x - вектор для умножения
# y - результирующий вектор (инициализирован нулями)
n = len(ia) - 1
for i in range(n):
    # y[i] = 0 # Если не инициализирован нулями
    for k in range(ia[i], ia[i+1]):
        # Доступ к элементам i-й строки
        # sa[k] - значение элемента
        # ja[k] - номер столбца
        y[i] += sa[k] * x[ja[k]]
```

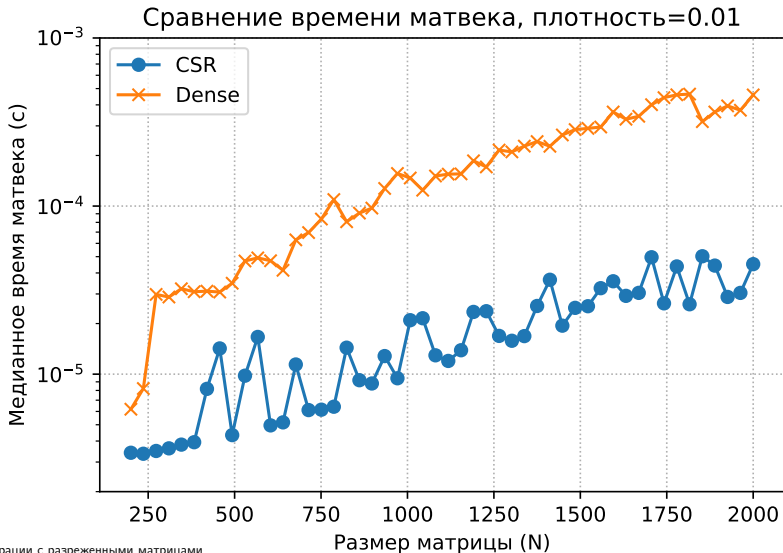
**Сложность:**  $\mathcal{O}(\text{nnz})$  операций, что гораздо быстрее  $\mathcal{O}(N^2)$  для плотного формата, если  $\text{nnz} \ll N^2$ .

## Пример: Сравнение скорости SpMV (Плотный vs CSR) Фиксированное количество ненулевых элементов





## Пример: Сравнение скорости SpMV (Плотный vs CSR) Фиксированная плотность



## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

### Итерационные методы:

- Строят последовательность приближений  $x_0, x_1, \dots$ , сходящуюся к решению.



## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

### Итерационные методы:

- Строят последовательность приближений  $x_0, x_1, \dots$ , сходящуюся к решению.
- Основная операция - **SpMV** ( $Ax_k$  или  $A^T x_k$ ).

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

### Итерационные методы:

- Строят последовательность приближений  $x_0, x_1, \dots$ , сходящуюся к решению.
- Основная операция - **SpMV** ( $Ax_k$  или  $A^T x_k$ ).
- Не требуют явного хранения факторов  $L, U$ .

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

### Итерационные методы:

- Строят последовательность приближений  $x_0, x_1, \dots$ , сходящуюся к решению.
- Основная операция - **SpMV** ( $Ax_k$  или  $A^T x_k$ ).
- Не требуют явного хранения факторов  $L, U$ .
- Примеры: Метод сопряженных градиентов (CG), GMRES, BiCGStab.

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

### Итерационные методы:

- Строят последовательность приближений  $x_0, x_1, \dots$ , сходящуюся к решению.
- Основная операция - **SpMV** ( $Ax_k$  или  $A^T x_k$ ).
- Не требуют явного хранения факторов  $L, U$ .
- Примеры: Метод сопряженных градиентов (CG), GMRES, BiCGStab.
- Часто требуют **предобуславливания** для ускорения сходимости.

## Решение линейных систем $Ax = b$

Если  $A$  разреженная, стандартное LU-разложение ( $A = LU$ ) приведет к **заполнению** (fill-in) - факторы  $L$  и  $U$  могут стать плотными или гораздо менее разреженными, чем  $A$ .

### Прямые методы:

- Используют модификации LU-разложения (или Холецкого для SPD матриц).
- **Ключевая идея: Перестановки** строк и столбцов ( $PAP^T = LU$ ) для минимизации заполнения.
- Алгоритмы: Nested Dissection, Minimum Degree.
- Библиотеки: `scipy.sparse.linalg.spsolve` (использует UMFPACK или SuperLU), PARDISO, MUMPS.
- Эффективны для умеренно больших задач.

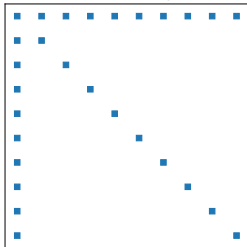
### Итерационные методы:

- Строят последовательность приближений  $x_0, x_1, \dots$ , сходящуюся к решению.
- Основная операция - **SpMV** ( $Ax_k$  или  $A^T x_k$ ).
- Не требуют явного хранения факторов  $L, U$ .
- Примеры: Метод сопряженных градиентов (CG), GMRES, BiCGStab.
- Часто требуют **предобуславливания** для ускорения сходимости.
- Предпочтительны для очень больших задач.

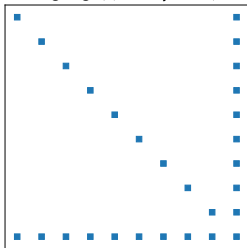
# Пример: потеря разреженности

Влияние перестановок на заполненность при LU-разложении

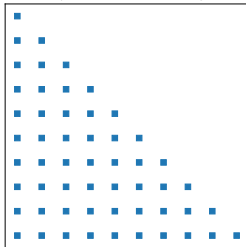
Исходная A (28 ненулевых)



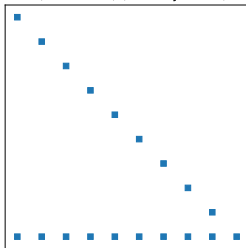
P @ A @ Q (28 ненулевых)



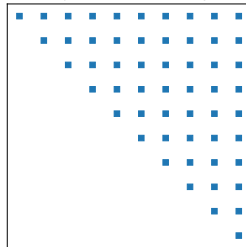
L (без перестановок) (55 ненулевых)



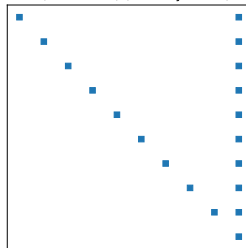
L (с COLAMD) (19 ненулевых)



U (без перестановок) (55 ненулевых)



U (с COLAMD) (19 ненулевых)



## Заключение

- Разреженные матрицы экономят память и ускоряют вычисления для многих задач.

## Заключение

- Разреженные матрицы экономят память и ускоряют вычисления для многих задач.
- Формат CSR является стандартом де-факто для эффективного SpMV.



## Заключение

- Разреженные матрицы экономят память и ускоряют вычисления для многих задач.
- Формат CSR является стандартом де-факто для эффективного SpMV.
- Решение СЛАУ с разреженными матрицами требует специальных прямых или итерационных методов.

# Заключение

- Разреженные матрицы экономят память и ускоряют вычисления для многих задач.
- Формат CSR является стандартом де-факто для эффективного SpMV.
- Решение СЛАУ с разреженными матрицами требует специальных прямых или итерационных методов.
- `scipy.sparse` предоставляет базовые инструменты для работы с разреженными матрицами в Python.

## Упражнения для самостоятельной работы

## Упражнение 1: Форматы COO и CSC

Преобразуйте матрицу  $B$  из предыдущего упражнения в форматы COO и CSC вручную:

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \\ 8 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Запишите соответствующие массивы для каждого формата.

## Упражнение 2: SpMV в Python

Используя `scipy.sparse`, создайте матрицу  $A$  из примера в формате CSR:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

Создайте случайный вектор  $x$  подходящего размера. Вычислите произведение  $y = Ax$  с помощью функции `A.dot(x)` или оператора `A @ x`. Проверьте результат вручную для небольшого примера.

## Упражнение: разреженность факторов

Проверьте численно сохраняется ли разреженность факторов у следующих матричных разложений:

- LU-разложение ✗

## Упражнение: разреженность факторов

Проверьте численно сохраняется ли разреженность факторов у следующих матричных разложений:

- LU-разложение ✖
- QR-разложение

## Упражнение: разреженность факторов

Проверьте численно сохраняется ли разреженность факторов у следующих матричных разложений:

- LU-разложение ✗
- QR-разложение
- SVD



## Упражнение: разреженность факторов

Проверьте численно сохраняется ли разреженность факторов у следующих матричных разложений:

- LU-разложение ✗
- QR-разложение
- SVD
- Разложение Шура

## Упражнение 4: Заполнение (Fill-in)

Рассмотрим матрицу

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

Найдите её LU-разложение (например, с помощью `scipy.linalg.lu`). Сравните количество ненулевых элементов в исходной матрице  $C$  и в факторах  $L$  и  $U$ . Обсудите наблюдаемое явление заполнения. Как перестановка строк/столбцов могла бы повлиять на заполнение (теоретически)?