Обзор методов LU разложения для больших разреженных матриц

Akim & Denis

Аким Каленюк Денис Борисов

Постановка задачи

В ходе выполнения работы нами было принято решение сосредоточиться на следующих целях:

- Изучить разнообразные методы LU разложения для разреженных матриц
- Изучить проблему fill-in, при которой разреженная матрица при LU разложении раскладывается на 2 плотные матрицы, из-за чего мы теряем преимущество при решении СЛУ.
- Сосредоточить свое внимание на различных методах, решающих проблему fill-in
- P.S. В первую очередь, мы смотрим на заполнение получившихся треугольных матриц, а за тем на точность и скорость алгоритма

Fill-In Problem

Fill-In Problem

Основа Проблемы: В процессе преобразования или факторизации разреженной матрицы могут возникать новые ненулевые элементы в позициях, которые изначально были нулевыми. Это увеличивает количество ненулевых элементов в матрице, что приводит к потере разреженности матрицы.

Причины и Следствия: При выполнении операций, таких как метод Гаусса, элементы матрицы, которые были нулями, могут превратиться в ненулевые. Это увеличивает объем занимаемой памяти и вычислительные затраты, так как в дальнейших расчетах эти новые ненулевые элементы необходимо учитывать.

Пример с LU-разложением: В процессе LU-разложения разреженной матрицы элементы, которые изначально были нулями, могут стать ненулевыми в матрицах L (нижней треугольной) или U (верхней треугольной), что приводит к увеличению памяти, необходимой для хранения этих матриц, а также снижает эффективность решения линейных уравнений (было отмечено выше)

Методы борьбы с проблемой: Перед факторизацией матрицы её строки и столбцы могут быть переупорядочены таким образом, чтобы минимизировать количество ненулевых элементов, которые будут созданы в процессе. Например, алгоритм Reverse Cuthill-McKee.

Incomplete LU Decomposition

Incomplete LU Decomposition

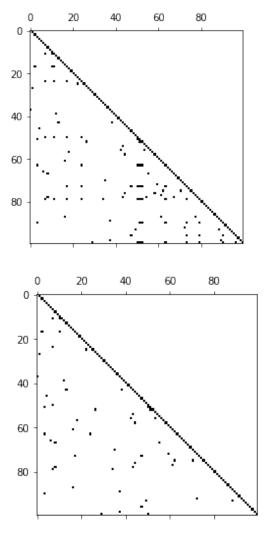
- В отличие от стандартного LU: L U ≃ A без строгого равенства
- Более эффективный по сложности и времени чем стандартный алгоритм LU. Тем не менее, значительно уступает оптимизированным алгоритмам в сложности. Интересно, что в нашем случае ошибка на ILU меньше ошибки нашей кастомной LU.
- Есть ряд реализаций в зависимости от задач и требований к точности: через запоминаний элементов исходной матрицы, через трешолд по абсолютной величине элементов и многое другое.
- Эффективно решает такие задачи как ускорение метода сопряженных градиентов, работая как предобуславливатель
- Эффективно решает проблему fill-in

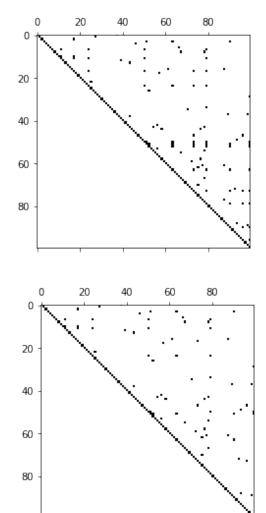
```
def Incomplete LU Decomposition(A):
  n = number_of_rows(A)
  # Initialize L as a zero matrix of size n x n
  L = Zero_Matrix(n, n)
  # Initialize U as a zero matrix of size n x n
  U = Zero_Matrix(n, n)
  for i from 0 to n-1:
    for j from 0 to n-1:
       if i <= j:
          # Calculate U[i, i]
          sum = 0
          for k from 0 to i-1:
            sum += L[i, k] * U[k, i]
          U[i, j] = A[i, j] - sum
       if i >= j:
          # Calculate L[i, i]
         if i == j:
            L[i, i] = 1
          else:
            sum = 0
            for k from 0 to j-1:
               sum += L[i, k] * U[k, j]
            L[i, j] = (A[i, j] - sum) / U[j, j]
  return L, U
```

Incomplete LU

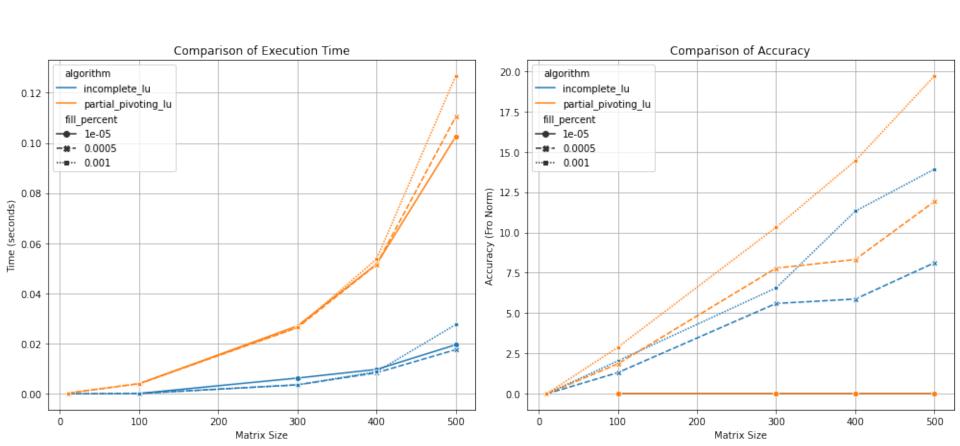
• LU

• ILU





Заметим, что ILU имеет заметный выигрыш в скорости в сравнении с нашим кастомным PLU, а также меньшие темпы роста ошибки



Nested Dissection

Nested Dissection

- Основная идея метода: LU-разложение с Nested Dissection (вложенной секционированием) это метод разложения разреженных матриц. Основная идея состоит в разбиении графа матрицы на более мелкие части (секционирование), что позволяет эффективно выполнять LU-разложение на этих подграфах, уменьшая сложность и объем вычислений.
- Ключевые особенности: Основными особенностями являются улучшенная масштабируемость и эффективность для больших матриц. Метод уменьшает количество необходимых заполнений (fill-ins) в процессе разложения, что важно для уменьшения использования памяти и ускорения вычислений. Это делает его особенно полезным для высокопроизводительных вычислений и приложений, требующих обработки больших объемов данных.

```
def LU_Decomposition_With_Nested_Dissection(A):
```

#A is a sparse matrix

#Step 1: Decompose the graph of A using Nested Dissection

Graph = Convert_Matrix_To_Graph(A)

Partitioned_Graph = Nested_Dissection(Graph)

#Step 2: Apply LU Decomposition to each partition

for each Subgraph in Partitioned_Graph:

#Extract submatrix corresponding to the current subgraph

Submatrix = Extract_Submatrix(A, Subgraph)

#Perform standard LU Decomposition on the submatrix
L, U = Standard_LU_Decomposition(Submatrix)

#Update the original matrix A with L and U values
Update_Matrix(A, L, U, Subgraph)

return A

def Nested_Dissection(Graph):

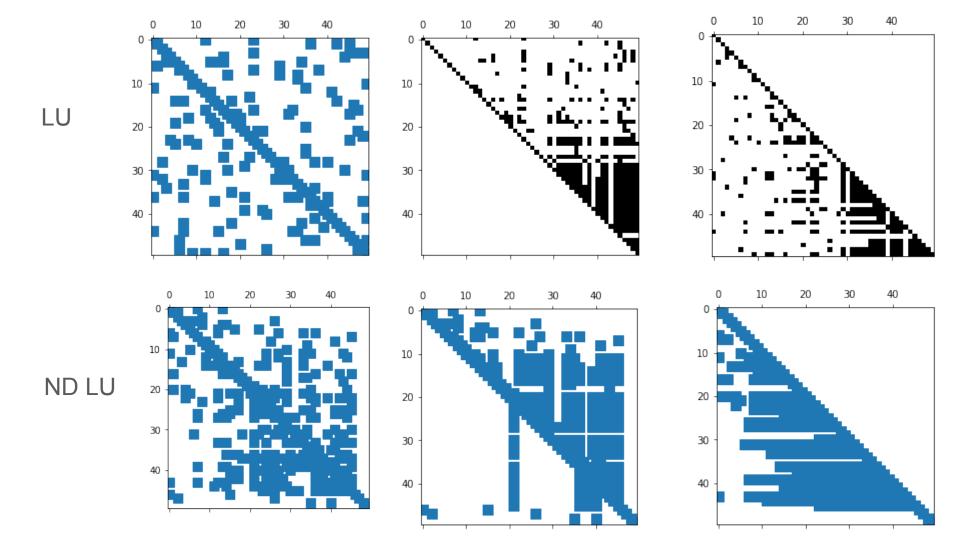
#Recursively divide the graph into smaller parts

if Graph is small enough: return [Graph]

#Divide the graph into two parts with a separator Part1, Separator, Part2 = Divide_Graph(Graph)

#Recursively apply Nested Dissection to the parts
Subgraphs1 = Nested_Dissection(Part1)
Subgraphs2 = Nested_Dissection(Part2)

raturn Subaranhe1 ± [Sanarator] ± Subaranhe2



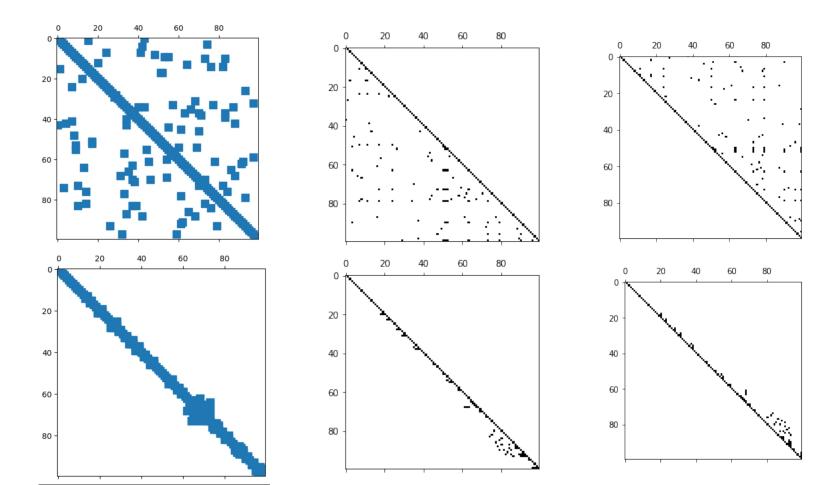
Reverse Cuthill-McKee

Reverse Cuthill-McKee

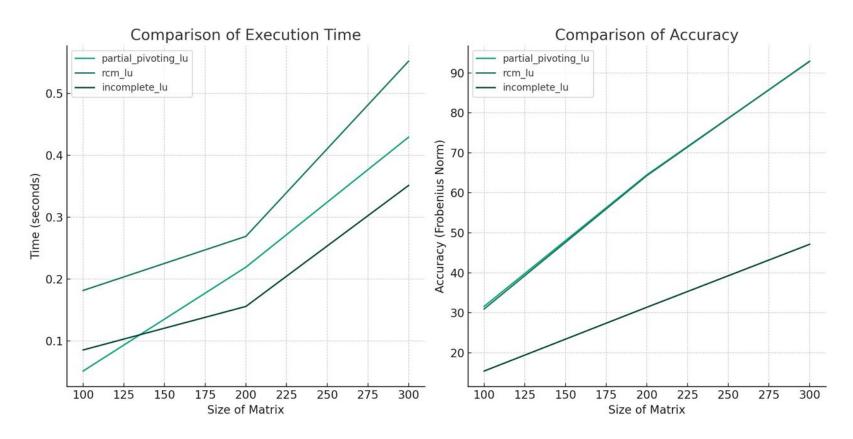
Алгоритм Reverse Cuthill-McKee (RCM) используется для переупорядочивания разреженных матриц перед LUразложением. Основная цель минимизировать ширину полосы матрицы, что приводит к уменьшению числа ненулевых элементов вне диагонали. Это достигается путём переупорядочивания строк и столбцов матрицы таким образом, чтобы элементы с ненулевыми значениями располагались ближе к диагонали.

```
def LU Decomposition With RCM(A):
  # A is a sparse matrix
  # Step 1: Apply RCM algorithm to reorder the matrix
  RCM Order = Reverse Cuthill McKee(A)
  Reordered A = Reorder Matrix(A, RCM Order)
  # Step 2: Apply standard LU to the reordered matrix
  L, U = Standard LU Decomposition(Reordered A)
  return L, U
def Reverse Cuthill McKee(Matrix):
  # Convert the matrix to a graph representation
  Graph = Matrix To Graph(Matrix)
  # Compute the RCM ordering
  RCM Order = Compute RCM Ordering(Graph)
  return RCM Order
```

Reverse Cuthill-McKee



Summary!!!



Conclusions

- В рамках проекта мы исследовали различные методы LU разложений для разреженных матриц. Реализовали их с нуля и показали графически проблему fill-in и ее решение.
- Планировалось реализовать 4 алгоритма и измерить их качество и время работы
- Мы полноценно реализовали 3 алгоритма, показали проблему fill-in, однако столкнулись с рядом вычислительных сложностей в случае алгоритма Nested Dissection на разреженных матрицах

Github

https://github.com/Akim-collab/LU-decomposition-for-large-sparse-matrices