

MATRICES DISPERSAS

ALAN REYES-FIGUEROA MÉTODOS NUMÉRICOS II

(AULA 13) 18.AGOSTO.2021

Consideremos el siguiente problema.



Consideremos el siguiente problema. Se quiere resolver la ecuación de Poisson en una región rectangular $D = [0, \ell_1] \times [0, \ell_2] \subset \mathbb{R}^2$.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f(x,y), \qquad (x,y) \in [0,\ell_1] \times [0,\ell_2].$$

Consideremos el siguiente problema. Se quiere resolver la ecuación de Poisson en una región rectangular $D = [0, \ell_1] \times [0, \ell_2] \subset \mathbb{R}^2$.

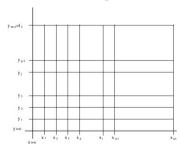
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f(x,y), \qquad (x,y) \in [0,\ell_1] \times [0,\ell_2].$$

Para resolver el problema de forma numérica, el primer paso consiste en discretizar el dominio rectangular *D*, mediante una malla regular (nodos igualmente espaciados)

Consideremos el siguiente problema. Se quiere resolver la ecuación de Poisson en una región rectangular $D = [0, \ell_1] \times [0, \ell_2] \subset \mathbb{R}^2$.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f(x,y), \qquad (x,y) \in [0,\ell_1] \times [0,\ell_2].$$

Para resolver el problema de forma numérica, el primer paso consiste en discretizar el dominio rectangular *D*, mediante una malla regular (nodos igualmente espaciados)



$$x_i = i\Delta_x$$
, para $i = 0, 1, 2, ..., n + 1$,
 $y_j = j\Delta_y$, para $j = 0, 1, 2, ..., m + 1$,



$$x_i = i\Delta_x$$
, para $i = 0, 1, 2, ..., n + 1$,
 $y_j = j\Delta_y$, para $j = 0, 1, 2, ..., m + 1$,

Utilizando una aproximación (de diferencias finitas) para las segundas derivadas parciales, se tiene que

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(u_i, u_j) \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{ij} + u_{i+1,j}}{\Delta_x^2},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(u_i, u_j) \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{ij} + u_{i,j+1}}{\Delta_y^2},$$

donde $u_{ij} = u(x_i, y_j)$.



$$x_i = i\Delta_x$$
, para $i = 0, 1, 2, ..., n + 1$,
 $y_j = j\Delta_y$, para $j = 0, 1, 2, ..., m + 1$,

Utilizando una aproximación (de diferencias finitas) para las segundas derivadas parciales, se tiene que

$$\begin{array}{lcl} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(u_i,u_j) & \approx & \frac{u_{i-1,j}-2u_{ij}+u_{i+1,j}}{\Delta_x^2}, \\ \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(u_i,u_j) & \approx & \frac{u_{i,j-1}-2u_{ij}+u_{i,j+1}}{\Delta_v^2}, \end{array}$$

donde $u_{ij} = u(x_i, y_j)$. Así, la ecuación de Poisson puede aproximarse en la forma

$$\frac{1}{\Delta_{\mathsf{x}}^2}(u_{i-1,j}-2u_{ij}+u_{i+1,j})+\frac{1}{\Delta_{\mathsf{v}}^2}(u_{i,j-1}-2u_{ij}+u_{i,j+1})=-f_{ij}.$$



$$x_i = i\Delta_x$$
, para $i = 0, 1, 2, ..., n + 1$,
 $y_j = j\Delta_y$, para $j = 0, 1, 2, ..., m + 1$,

Utilizando una aproximación (de diferencias finitas) para las segundas derivadas parciales, se tiene que

$$\begin{array}{lcl} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(u_i,u_j) & \approx & \frac{u_{i-1,j}-2u_{ij}+u_{i+1,j}}{\Delta_x^2}, \\ \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(u_i,u_j) & \approx & \frac{u_{i,j-1}-2u_{ij}+u_{i,j+1}}{\Delta_v^2}, \end{array}$$

donde $u_{ij} = u(x_i, y_j)$. Así, la ecuación de Poisson puede aproximarse en la forma

$$\frac{1}{\Delta_{\mathsf{x}}^2}(u_{i-1,j}-2u_{ij}+u_{i+1,j})+\frac{1}{\Delta_{\mathsf{y}}^2}(u_{i,j-1}-2u_{ij}+u_{i,j+1})=-f_{ij}.$$

Si el mallado tiene $m \times n$ nodos, las ecuaciones anteriores definen un sistema lineal de tamaño $mn \times mn$.

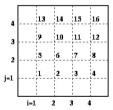


Para ello, se ordenan los nodos del mallado de algun modo. Una posibilidad es utilizar el orden dado por la filas (similar a cuando se vectoriza una matriz):

$$l = i + nj$$
, para $i = 0, 1, ..., n - 1$; $j = 0, 1, ..., m - 1$.

Para ello, se ordenan los nodos del mallado de algun modo. Una posibilidad es utilizar el orden dado por la filas (similar a cuando se vectoriza una matriz):

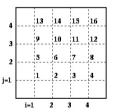
$$l = i + nj$$
, para $i = 0, 1, ..., n - 1$; $j = 0, 1, ..., m - 1$.



Reordenamiento de los nodos (i, j).

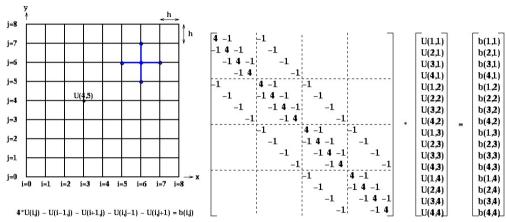
Para ello, se ordenan los nodos del mallado de algun modo. Una posibilidad es utilizar el orden dado por la filas (similar a cuando se vectoriza una matriz):

$$l = i + nj$$
, para $i = 0, 1, ..., n - 1$; $j = 0, 1, ..., m - 1$.

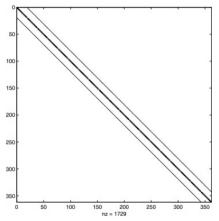


Reordenamiento de los nodos (i, j).

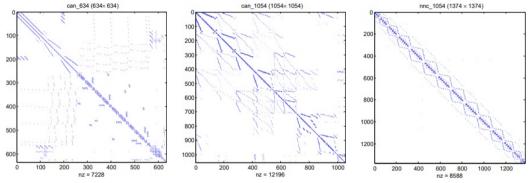
Así, se obtiene un sistema de ecuaciones de la forma $A\mathbf{u} = \mathbf{f}$, con $A \in \mathbb{R}^{mn \times mn}$, y $\mathbf{u}, \mathbf{f} \in \mathbb{R}^{mn}$. Por lo general, A es una matriz con poco contenido.



(a) Conectividad de cada nodo con sus 4 vecinos. (b) Matriz A para el mallado de 4×4 .



Matriz A para la ecuación de Possion 2D.



Otros ejemplos de matrices comunes en aplicaciones.

https://math.nist.gov/MatrixMarket/
https://sparse.tamu.edu/



Se llama **matriz dispersa** o **matriz rala** (*sparse matrix*) a una matriz cuyos elementos la mayoría son cero.



Se llama **matriz dispersa** o **matriz rala** (*sparse matrix*) a una matriz cuyos elementos la mayoría son cero.

En el caso de matrices dispersas, se puede hacer uso de técnicas especiales para obtener ventaja del gran número de elementos ceros que posee.



Se llama **matriz dispersa** o **matriz rala** (*sparse matrix*) a una matriz cuyos elementos la mayoría son cero.

En el caso de matrices dispersas, se puede hacer uso de técnicas especiales para obtener ventaja del gran número de elementos ceros que posee.

Observaciones:

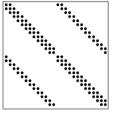
- Algunos autores definen una matriz $n \times n$ como dispersa si el número de elementos no nulos se comporta como $n^{\gamma+1}$, con o $< \gamma < 1$.
- Valores típicos de γ son:
 - $\star~\gamma=$ 0.2 para problemas de análisis de sistemas eléctricos de generación, y transporte de energía;
 - $\star~\gamma =$ 0.5 para matrices asociadas a problemas de análisis de estructuras.
- Estas matrices ralas aparecen en muchas aplicaciones: solución de EDPs, problemas de transporte, modelación de redes, estructuras, métodos de aprendizaje automático.

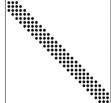
Hay dos tipos de matrices dispersas:

• <u>Estructuradas</u>: Los elementos no cero forman un patrón regular, por ejemplo, se agrupan a lo largo de un número pequño de diagonales.

Hay dos tipos de matrices dispersas:

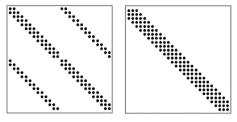
 <u>Estructuradas</u>: Los elementos no cero forman un patrón regular, por ejemplo, se agrupan a lo largo de un número pequño de diagonales.
 Un caso especial de matrices estructuradas son las matrices banda





Hay dos tipos de matrices dispersas:

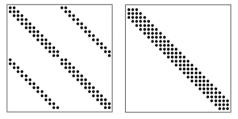
 <u>Estructuradas</u>: Los elementos no cero forman un patrón regular, por ejemplo, se agrupan a lo largo de un número pequño de diagonales.
 Un caso especial de matrices estructuradas son las matrices banda



• No estructuradas: Los elementos no cero se distribuyen de forma irregular.

Hay dos tipos de matrices dispersas:

 <u>Estructuradas</u>: Los elementos no cero forman un patrón regular, por ejemplo, se agrupan a lo largo de un número pequño de diagonales.
 Un caso especial de matrices estructuradas son las matrices banda



• No estructuradas: Los elementos no cero se distribuyen de forma irregular.

En el primer caso se pueden diseñar métodos basados en la estructura de las matrices, mientras que en el segundo caso sólo se puede hacer uso de la *raleza* de la matriz.

Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, llamaremos n_z al número de elementos no mulos de A. Revisamos alguno de los esquemas de almacenamiento más comunes para matrices dispersas.



Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, llamaremos n_z al número de elementos no mulos de A. Revisamos alguno de los esquemas de almacenamiento más comunes para matrices dispersas.

Esquema coordenado: (COO)



Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, llamaremos n_z al número de elementos no mulos de A. Revisamos alguno de los esquemas de almacenamiento más comunes para matrices dispersas.

Esquema coordenado: (COO)

Con este esquema, para representar la matriz A se utilizan tres vectores \mathbf{v}_A , I_A , y J_A de dimensión n_z .

Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, llamaremos n_z al número de elementos no mulos de A. Revisamos alguno de los esquemas de almacenamiento más comunes para matrices dispersas.

Esquema coordenado: (COO)

Con este esquema, para representar la matriz A se utilizan tres vectores \mathbf{v}_A , I_A , y J_A de dimensión n_z .

- En el vector \mathbf{v}_A se almacenan los elementos no nulos de A (los valores a_{ii});
- en I_A , se almacenan los números de fila i asociados a cada entrada no nula a_{ij} de A;
- y en J_A el número de columna j asociado a cada elemento no nulo de A.

Ejemplo: La matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 0 & 5 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 7 & 8 \\ 0 & 0 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10 \end{pmatrix}$$

Ejemplo: La matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 0 & 5 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 7 & 8 \\ 0 & 0 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10 \end{pmatrix}$$

se escribe en el formato coordenado, como los vectores

Ejemplo: La matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 0 & 5 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 7 & 8 \\ 0 & 0 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10 \end{pmatrix}$$

se escribe en el formato coordenado, como los vectores

$$\mathbf{v}_A = \begin{pmatrix} 10 & 8 & 5 & 1 & 2 & 3 & 6 & 4 & 7 & 9 \end{pmatrix},$$
 $I_A = \begin{pmatrix} 5 & 3 & 2 & 1 & 1 & 2 & 3 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix},$
 $J_A = \begin{pmatrix} 5 & 5 & 4 & 1 & 4 & 1 & 1 & 2 & 4 & 3 \end{pmatrix}.$

Cuidado! En el formato de indexado de Python, tendríamos

$$\mathbf{v}_A = \begin{pmatrix} 10 & 8 & 5 & 1 & 2 & 3 & 6 & 4 & 7 & 9 \end{pmatrix},$$
 $I_A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix},$
 $J_A = \begin{pmatrix} 4 & 4 & 3 & 0 & 3 & 0 & 0 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}.$

Esquema CSR: (Compressed sparse row)



Esquema CSR: (Compressed sparse row)

Si se introducen los elementos de la matriz ordenados por filas, es posible utilizar un formato más compacto denominado CSR (formato comprimido de filas). En este caso

Esquema CSR: (Compressed sparse row)

Si se introducen los elementos de la matriz ordenados por filas, es posible utilizar un formato más compacto denominado CSR (formato comprimido de filas). En este caso

- \mathbf{v}_A , de dimensión n_z , que contiene los elementos no nulos de A, ordenados por filas;
- J_A , también de dimensión n_z , que contiene los números de las columnas j de los elementos no nulos a_{ij} de A,
- I_A , de dimensión m + 1 con la siguiente estructura:

$$I_A(1)=1,$$
 $I_A(i+1)-I_A(i)=$ número de elementos no nulos en la fila i .

Esquema CSR: (Compressed sparse row)

Si se introducen los elementos de la matriz ordenados por filas, es posible utilizar un formato más compacto denominado CSR (formato comprimido de filas). En este caso

- \mathbf{v}_A , de dimensión n_z , que contiene los elementos no nulos de A, ordenados por filas;
- J_A , también de dimensión n_z , que contiene los números de las columnas j de los elementos no nulos a_{ij} de A,
- I_A , de dimensión m + 1 con la siguiente estructura:

$$I_A(1)=1,$$
 $I_A(i+1)-I_A(i)=$ número de elementos no nulos en la fila i .

De esta última ecuación se tiene que $I_A(i+1)$ corresponde a

$$I_A(i+1) = 1 + \#\{\text{elementos no nulos en las primeras } i \text{ filas}\}.$$

Esquema CSC: (Compressed sparse column)



Esquema CSC: (Compressed sparse column)

Análogamente, existe un formato similar, pero con los elementos de la matriz ordenados por columnas. Este formato se llama CSC (formato comprimido de columnas). En este caso

Esquema CSC: (Compressed sparse column)

Análogamente, existe un formato similar, pero con los elementos de la matriz ordenados por columnas. Este formato se llama CSC (formato comprimido de columnas). En este caso

- \mathbf{v}_A , de dimensión n_z , que contiene los elementos no nulos de A, ordenados por filas;
- I_A , también de dimensión n_z , que contiene los números de las filas i de los elementos no nulos a_{ii} de A,
- J_A , de dimensión n + 1 con la siguiente estructura:

$$J_A(1)=1,$$
 $J_A(j+1)-I_A(j)=$ número de elementos no nulos en la columna j .

Esquema CSC: (Compressed sparse column)

Análogamente, existe un formato similar, pero con los elementos de la matriz ordenados por columnas. Este formato se llama CSC (formato comprimido de columnas). En este caso

- \mathbf{v}_A , de dimensión n_z , que contiene los elementos no nulos de A, ordenados por filas;
- I_A , también de dimensión n_z , que contiene los números de las filas i de los elementos no nulos a_{ij} de A,
- J_A , de dimensión n + 1 con la siguiente estructura:

$$J_A(1) = 1,$$

 $J_A(j+1) - I_A(j) = \text{número de elementos no nulos en la columna } j.$

De esta última ecuación se tiene que $J_A(j+1)$ corresponde a

$$J_A(j+1) = 1 + \#\{\text{elementos no nulos en las primeras } j \text{ columnas}\}.$$

Así, la matriz A en el formato CSR se representa por

$$\mathbf{v}_A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \end{pmatrix},$$
 $J_A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 & 2 & 4 & 1 & 4 & 5 & 3 & 5 \end{pmatrix},$
 $J_A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 6 & 9 & 10 & 11 \end{pmatrix}.$

Así, la matriz A en el formato CSR se representa por

$$\mathbf{v}_A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \end{pmatrix},$$
 $J_A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 & 2 & 4 & 1 & 4 & 5 & 3 & 5 \end{pmatrix},$
 $J_A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 6 & 9 & 10 & 11 \end{pmatrix}.$

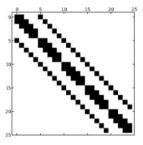
Mientras que A, en el formato CSC se representa por

$$\mathbf{v}_A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 6 & 4 & 9 & 2 & 5 & 7 & 8 & 10 \end{pmatrix},$$
 $I_A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 2 & 4 & 1 & 2 & 3 & 3 & 5 \end{pmatrix},$
 $J_A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 5 & 6 & 9 & 11 \end{pmatrix}.$

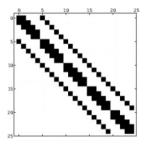
Esquema DIA: (*|Diagonal*) El esquema diagonal se usa cuando los elementos no nulos se restringen a un reducido número de diagonales.



Esquema DIA: (*|Diagonal*) El esquema diagonal se usa cuando los elementos no nulos se restringen a un reducido número de diagonales.



Esquema DIA: (*|Diagonal*) El esquema diagonal se usa cuando los elementos no nulos se restringen a un reducido número de diagonales.



El formato diagonal está formado por una matriz de datos (que almacena los valores no nulos a_{ij}) y un vector con los *offsets* (que almacena el *offset* de cada diagonal con respecto a la diagonal principal).

Por convención, a la diagonal principal le corresponde el *offset* o. Los valores de *i* positivos corresponden a diagonales superiores, mientras que los negativos a las inferiores.



Por convención, a la diagonal principal le corresponde el *offset* o. Los valores de *i* positivos corresponden a diagonales superiores, mientras que los negativos a las inferiores.

Dada la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 0 \\ 5 & 0 & 3 & 9 \\ 0 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Por convención, a la diagonal principal le corresponde el *offset* o. Los valores de *i* positivos corresponden a diagonales superiores, mientras que los negativos a las inferiores.

Dada la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 0 \\ 5 & 0 & 3 & 9 \\ 0 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

El formato diagonal viene dado por

$$dat = egin{pmatrix} * & 1 & 7 \ * & 2 & 8 \ 5 & 3 & 9 \ 6 & 4 & * \end{pmatrix}, \qquad \textit{off} = egin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Una de las librerías más usadas para el manejo de matrices ralas es SPARSKIT. En Python, por ejemplo dentro de Scipy, tenemos el módulo SPARSE (scipy.sparse y scipy.sparse.linalg).

Una de las librerías más usadas para el manejo de matrices ralas es SPARSKIT. En Python, por ejemplo dentro de Scipy, tenemos el módulo SPARSE (scipy.sparse y scipy.sparse.linalg).

Esta librería incluyen funciones para la conversión entre formatos ralos:

- DNS Formato denso
- BND Linpack Banded format
- BSR Block Sparse Row format
- CSR Compressed Sparse Row format
- CSC Compressed Sparse Column format
- COO Coordinate format
- DIA Diagonal format
- LIL Row-based list of lists format
- ..



¿Qué ocurre con las operaciones relacionadas con matrices ralas?



¿Qué ocurre con las operaciones relacionadas con matrices ralas? ¿Funcionan los mismos métodos que ya sabemos de álgebra lineal?



¿Qué ocurre con las operaciones relacionadas con matrices ralas? ¿Funcionan los mismos métodos que ya sabemos de álgebra lineal? **Respuesta: No.** Hay que adaptar toda el álgebra lineal a estos formatos.



¿Qué ocurre con las operaciones relacionadas con matrices ralas? ¿Funcionan los mismos métodos que ya sabemos de álgebra lineal? **Respuesta: No.** Hay que adaptar toda el álgebra lineal a estos formatos.

Ejemplo:

Una de las operaciones más importantes en los métodos iterativos para la solución de sistemas de ecuaciones lineales es el producto matriz-vector.

¿Qué ocurre con las operaciones relacionadas con matrices ralas? ¿Funcionan los mismos métodos que ya sabemos de álgebra lineal? **Respuesta: No.** Hay que adaptar toda el álgebra lineal a estos formatos.

Ejemplo:

Una de las operaciones más importantes en los métodos iterativos para la solución de sistemas de ecuaciones lineales es el producto matriz-vector. En el esquema CSR, resulta

¿Qué ocurre con las operaciones relacionadas con matrices ralas? ¿Funcionan los mismos métodos que ya sabemos de álgebra lineal? **Respuesta: No.** Hay que adaptar toda el álgebra lineal a estos formatos.

Ejemplo:

Una de las operaciones más importantes en los métodos iterativos para la solución de sistemas de ecuaciones lineales es el producto matriz-vector. En el esquema CSR, resulta

```
Algoritmo: (Producto matriz-vector, esquema CSR) Inputs: A \in \mathbb{R}^{n \times n} en formato CSR, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. Outputs: \mathbf{y} = A\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. For i = 0, 2, \ldots, n-1: k_1 = I_A[i]. k_2 = I_A[i+1]: \mathbf{y}[i] = \mathbf{v}_A[k_1:k_2]^T\mathbf{x}[J_A[k_1:k_2]]. Return \mathbf{v}.
```

```
Algoritmo: (Producto matriz-vector, esquema CSC) Inputs: A \in \mathbb{R}^{n \times n} en formato CSC, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. Outputs: \mathbf{y} = A\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. For j = 0, 2, \ldots, n-1: k_1 = I_A[j]. k_2 = I_A[j+1]: \mathbf{y}[J_A[k_1:k_2]] = \mathbf{y}[J_A[k_1:k_2]]^\mathsf{T}\mathbf{x}_j\mathbf{v}_A[k_1:k_2]. Return \mathbf{v}.
```