6. Розріджені матриці

План. *Розріджені матриці, схеми зберігання розріджених матриць*

Аналіз методів дискретизації диференційних рівнянь в часткових похідних, зокрема, методу скінчених різниць та скінчених елементів, показує, що вони врешті решт зводяться до розв’язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь із розрідженими матрицями (наприклад, тридіагональними, п’ятидіагональними тощо).

Формального означення розрідженої матриці немає. Як правило, розрідженою вважають матрицю, що містить велику кількість нулів. Існують різні думки щодо того, наскільки великою повинна бути ця кількість: більше половини, більше третини тощо. Крім того, розріджені матриці можуть мати різну структуру: трикутну, стрічкову, розподілену (коли елементи розкидані по матриці і не утворюють діагоналі).

Оскільки розріджені матриці містять велику кількість нулів, здійснювати звичайні матричні операції над ними недоцільно. Набагато ефективніше виконувати операції лише над ненульовими елементами. Виходячи з того, легко збагнути. що і зберігати нулі не варто. Отже, виникає задача збереження розріджених матриць в упакованих форматах, без нулів.

Існує декілька схем зберігання розріджених матриць [1, 2]. Розглянемо їх у тому порядку, як вони наведені у Тьюарсона [1]. Як тестову матрицю будемо використовувати матрицю

$$A_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & a_{13} & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & a_{24} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 & 0 \\ a_{41} & 0 & 0 & 0 & a_{45} \\ 0 & a_{52} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Схема 1. Матриця зберігається по стовпцях. Кожному ненульовому елементу матриці відповідають дві комірки пам'яті: перша комірка містить номер рядка, а друга — значення елемента.

Номер рядка	Значення елемента

Нуль в першій комірці означає кінець стовпця. У цьому випадку друга комірка містить номер наступного стовпця. Нулі в обох комірках означають кінець масиву, в якому зберігається матриця. Наприклад, (0, 1) означатиме початок масиву, а (0, 0) — кінець масиву.

Загальна кількість записів (пар комірок) дорівнює $n+\tau+1$, де n — кількість записів для стовпців, τ — кількість записів для ненульових елементів матриці і один запис для кінця матриці. Оскільки кожний запис містить дві комірки, загальна кількість комірок пам'яті для збереження матриці за схемою 1 дорівнює $2(n+\tau+1)$.

Матриця A_5, для якої $\tau = 7$, $n = 5$, буде зберігатися у вигляді масиву

$$(0, 1; 2, a_{21}; 4, a_{41}; 0, 2; 5, a_{52}; 0, 3; 1, a_{13}; 3, a_{33}; 0, 4;$$
$$2, a_{24}; 0, 5; 4, a_{45}; 0, 0)$$

Оцінимо економію пам'яті в цій схемі в даному прикладі. Припустимо, що числа в матриці мають тип double, тобто займають 32 байта, а цілі числа типу int займають 16 байтів. Тоді в звичайній схемі для збереження матриці були використані 25*32 = 800 байтів. В схемі 1 зберігаються 7 чисел типу double, для яких виділяються 7*32 = 224 байта, і 19 цілих чисел типу int, для яких виділяються 19*16 = 304 байта. В сумі маємо 224 + 304 = 528. Отже, економія складає 33,3%.

Схема 2. Матриця зберігається по стовпцях. Інформація зберігається в трьох масивах: VE — значення ненульових елементів, RI — індекси рядків і CIP — вказівники індексів стовпців. Елемент RI[n] містить індекс рядка елемента VE[n]. Якщо перший ненульовий елемент m-го стовпця матриці зберігається в VE[t_m], то індекс t_m зберігається в m-му елементі масива CIP[m] = t_m.

Наприклад, матриця A_5 буде зберігатися так:

VE = ($a_{21}, a_{41}, a_{52}, a_{13}, a_{33}, a_{24}, a_{45}$)

RE = (2, 4, 5, 1, 3, 2, 4)

CIP = (1, 3, 4, 6, 7)

Знайдемо a_{13} в масиві VE. Оскільки $m = 3$, то CIP[3] = 4. Відповідно, RI[4] містить індекс рядка першого ненульового елемента третього стовпця. В нашому випадку RI[4] = 1, значить a_{13} міститься в VE[4].

Знайдемо a_{33} в масиві VE. Оскільки $m = 3$, то CIP[3] = 4. Відповідно, RI[4] містить індекс рядка першого ненульового елемента третього стовпця. Оскільки $a_{33} \neq 0$, то RI[4] або один з подальших елементів масиву RI, що передують першому ненульовому елементу 4-го стовпця, повинні дорівнювати 3. Значить a_{33} міститься в VE[5].

Знайдемо a_{24}. Оскільки $m = 4$, то CIP[4] = 6. Отже RI[6] — індекс рядка першого ненульового елемента 4-го стовпця. Якщо $a_{24} \neq 0$, то RI[6] = 2 і a_{24} міститься в VE[6].

Схема 3. Матриця зберігається по стовпцях. Кожному ненульовому елементу даної матриці однозначно ставиться у відповідність ціле число $\lambda(i,j)$, яке обчислюється як

$$\lambda(i,j) = i + (j-1)n,\ a_{ij} \neq 0.$$

Зберігання ненульових елементів забезпечується двома масивами: VE, що містить значення ненульових елементів, і допоміжного масива LD. Обидва масиви містять τ елементів, де τ — кількість ненульових елементів. В елементі LD(m) міститься число $\lambda(i,j)$, що відповідає елементу a_{ij} з комірки VE(m), де m = 1, 2, ..., τ.

Наприклад, матриця A_5 буде зберігатися так:

VE $= (a_{21}, a_{41}, a_{52}, a_{13}, a_{33}, a_{24}, a_{45})$

LD = (2, 4, 10, 11, 13, 17, 24)

Відновити вихідну матрицю за числом $\lambda(i,j)$ можна за таким правилом: j — найменше ціле число, що більше або дорівнює $\frac{\lambda(i,j)}{n}$, та $i = \lambda(i,j) - (j-1)n$. Наприклад, якщо $\lambda(i,j) =$ $=$ LD(5) = 13, то $\frac{\lambda(i,j)}{n} = \frac{13}{5}$ і найменшим цілим числом, що більше або дорівнює $\frac{\lambda(i,j)}{n}$, буде 3. Отже, j = 3 та $i = \lambda$ (i,j) $(j$ - $1)n$ = 13 – 10 = 3.

Схема 4 (CSR). Розріджена матриця зберігається з використанням трьох масивів по рядках:

- **aelem** містить всі ненульові елементи матриці A, перераховані по рядках;
- **jptr** містить стільки ж елементів, скільки й **aelem**, і для кожного з них указує, в якому стовбці перебуває даний елемент;
- **iptr** містить число елементів, що дорівнює розмірності системи, збільшеній на одиницю. Його i-й елемент указує, з якої позиції в масивах **aelem** і **jptr** починається i-й рядок матриці. Відповідно, **jptr[i+1]-iptr[i]** дорівнює кількості ненульових елементів в i-му рядку. Останній елемент **jptr[n+1]** дорівнює кількості елементів в масиві **aelem**, збільшеній на одиницю.

Приклад (n = 7)

$$A = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 & 3 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 11 & 2 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 10 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 9 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 12 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 3 & 0 & 8 \end{pmatrix}$$

aelem = $\left[\underbrace{9,3,1,1}_{4(1)}, \underbrace{11,2,1,2}_{4(5)}, \underbrace{1,10,2}_{3(9)}, \underbrace{2,1,2,9,1}_{5(12)}, \underbrace{1,1,12,1}_{4(17)}, \underbrace{8,}_{1(21)} \underbrace{2,2,3,8}_{4(22)} \right]$,

jptr = $\left[\underbrace{1,4,5,7}_{4(1)}, \underbrace{2,3,4,7}_{4(5)}, \underbrace{2,3,4}_{3(9)}, \underbrace{1,2,3,4,5}_{5(12)}, \underbrace{1,4,5,7}_{4(17)}, \underbrace{6,}_{1(21)} \underbrace{1,2,5,7}_{4(22)} \right]$,

iptr = [1, 5, 9, 12, 17, 21, 22, 26]

Фігурними дужками згруповані елементи, що належать тому самому рядку матриці. Під дужками указане число згрупованих елементів і порядковий номер першого з них в масиві.

Схема 5. Зберігання стрічкових матриць.

Будемо говорити, що матриця $A \in R^{m \times n}$ має *нижню ширину стрічки* p, якщо $a_{ij} = 0$ для $i > j + p$, і *верхню ширину стрічки* q, якщо із $j > i + q$ випливає, що $a_{ij} = 0$. Наведемо приклад матриці 8×5, де p = 1 і q = 2.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ 0 & 0 & 0 & a_{54} & a_{55} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{65} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Тип матриці	q	p
Діагональна	0	0
верхня трикутна	0	n–1
нижня трикутна	m–1	0
Тридіагональна	1	1
верхня дводіагональна	0	1
нижня дводіагональна	1	0
верхня хессенбергова (h_{ij} =0 якщо $i > j + 1$)	1	n–1
нижня хессенбергова (h_{ij} =0 якщо $j > i + 1$)	m–1	1

Нехай матриця $A \in R^{m\times n}$ має *нижню ширину стрічки* p і *верхню ширину стрічки* q, де числа p і q набагато менше n. Таку матрицю можна записати в масиві $B \in R^{(p+q+1)\times n}$, якщо прийняти узгодження

$$a_{ij} = B[i - j + q + 1][j].$$

Якщо n = 5, p = 1 і q = 5, то матрицю A можна записати як

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & a_{13} & a_{24} & a_{35} \\ 0 & a_{12} & a_{23} & a_{34} & a_{45} \\ a_{11} & a_{22} & a_{33} & a_{44} & a_{55} \\ a_{21} & a_{32} & a_{43} & a_{54} & a_{65} \end{pmatrix}.$$

Література

1. Тьюарсон Р. Разреженные матрицы. — М.: Мир, 1977. — 191 с.
2. Писсанецки С. Технология разреженных матриц. — М.: Мир, 1988. — 410 с..
3. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. — М.: Мир, 1984. — 333 с.