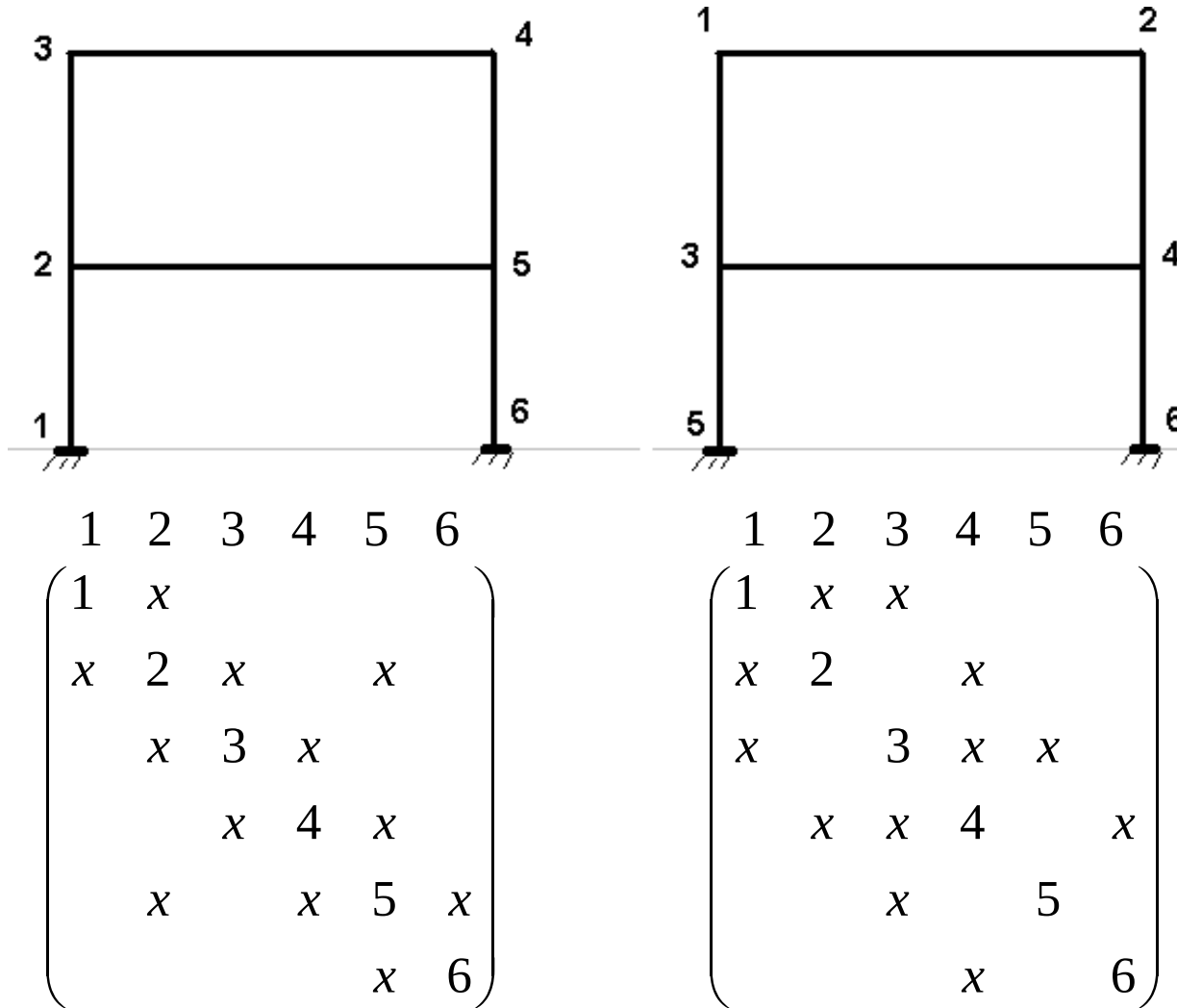


Macierzy rzadkie symetryczne

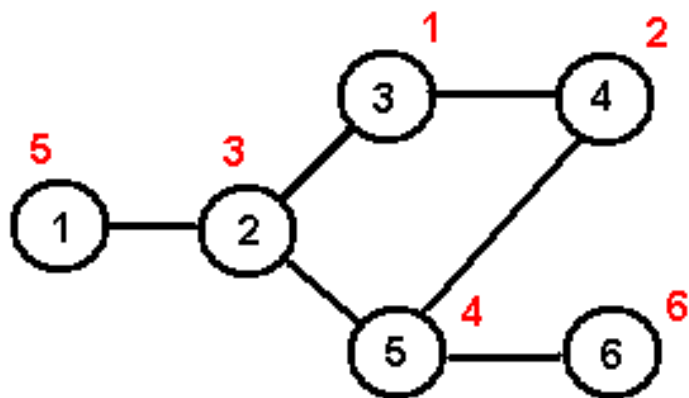
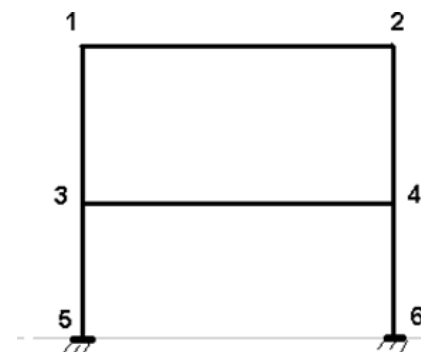
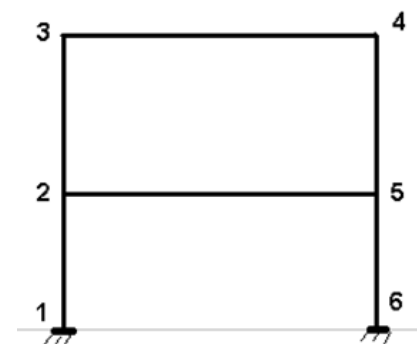
- Istnieje wielu problemów technicznych i naukowych, w których zastosowanie formalizacji matematycznej doprowadzi do działań nad macierzami rzadkimi symetrycznymi. To są zadania mechaniki, hydromechaniki, elektromagnetyzmu, fizyki jądra atomowego, modelowanie różnych systemów ekologicznych, Zwykle w takich zadaniach powstają macierzy rzadkie o dużym rozmiarze – setki tysięcy i miliony równań.
- Rzadkimi nazywamy takie macierzy, wielu elementów których są równe do zera. Działania nad takimi macierzami wymagają opracowania specjalnych struktur danych, które nadają możliwość obejść operacji nad elementami zerowymi. To istotnie podnosi wydajność obliczeń i zmniejsza zapotrzebowanie na pamięć główną.
- Podstawowe działania nad macierzami rzadkimi:
 - mnożenie macierzy przez wektor
 - faktoryzacja macierzy
 - proste i wsteczne podstawienia

- Typowymi przykładami, w których powstają macierzy rzadkie - to są przykłady z mechaniki konstrukcji



- Rozważymy przykład modelu obliczeniowego – ramy płaskiej. Model składa się z prętów i węzłów. Na rysunku są podane numery węzłów, które użytkownik wprowadzi w sposób losowy
- Stąd wynika, że dla tego samego modelu obliczeniowego możliwe w różne sposoby przenumerować węzły. Jak widać z portretów macierzy, przedstawionych pod każdym schematem obliczeniowym, położenie elementów niezerowych w macierzy zależy od sposobu numeracji.
- Portretem macierzy będziemy nazywali schemat położenia elementów niezerowych, który oznaczmy jako „x”. Elementy na głównej diagonalu zwykle są różne od zera (zerowe elementy na głównej diagonalu najczęściej są skutkami błędów modelu obliczeniowego). Dla ułatwienia pobrania numeru wiersza lub kolumny macierzy elementy na głównej diagonalu oznaczamy jako 1, 2, ..., N .
- Będziemy uważali, że każdy węzeł zawiera tylko jedno równanie. To pozwoli nam wprowadzić uproszczenie w rozważanie materiału bez utraty generalności. Jeśli każdy węzeł zawiera n równań, to każdy element macierzy należy potraktować jako blok macierzowy – gęsta podmacierz o rozmiarze $n \times n$ – trzeba zastąpić każdy element odpowiednim blokiem, co nie zmienia rozważania generalnego i wniosków ostatecznych.

- Struktura rzadka dla każdej macierzy wynika z tego, że każdy element macierzy o indeksach i, j powstaje przy łączeniu prętem (elementem skończonym) węzłów i, j . Jeśli topologia konstrukcji jest taka, że węzły k, m nie są łączone żadnym elementem skończonym, to element macierzy o indeksach k, m będzie zerowym.
- Portret macierzy istotnie zależy od sposobu numeracji węzłów, i dla macierzy symetrycznej jej struktura (portret) może być przedstawiona grafem nieskierowanym $G(X, E)$, gdzie X – zbiór wierzchołków, E – zbiór krawędzi grafu. W tym grafie wierzchołki reprezentują węzły modelu obliczeniowego, a krawędzi – pręty (elementy skończone). Dla macierzy rzadkiej kolumny albo wierszy (numery równań) są przedstawione wierzchołkami grafu, a elementy niezerowe – krawędziami grafu.
- Przejście od jednego układu numeracji węzłów do drugiego można przedstawić jako procedurę renumeracji. Na przykład, będziemy uważali, że pierwszy układ numeracji (przykład) jest początkowym. Wtedy drugi układ można przedstawić jako nową numerację (kolor czerwony na drugim grafie), i macierz w nowym układzie jest tworzona tak: na pierwszym miejscu stoi wierzchołek 3, na drugim – wierzchołek 4, trzecim – 2,


$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & x & & & & \\ x & 2 & x & & x & \\ & x & 3 & x & & \\ & & x & 4 & x & \\ & x & & x & 5 & x \\ & & & & x & 6 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 3 & 4 & 2 & 5 & 1 & 6 \\ 3 & x & x & & & \\ x & 4 & & x & & \\ x & & 2 & x & x & \\ & x & x & 5 & & x \\ & & x & & 1 & \\ & & & x & & 6 \end{pmatrix}$$


Przejdzie od jednego układu numeracji do drugiego można przedstawić w postaci matematycznej przez tablice permutacyjną (permutation array):

$$\text{old_number} = \text{Perm}[\text{new_number}]$$

Dla przykładu podanego: $\text{Perm} = (3 \ 4 \ 2 \ 5 \ 1 \ 6)$

old_number = Perm[new_number]	3	4	2	5	1	6
new_number	1	2	3	4	5	6

➤ Przetworzenie macierzy układu równań liniowych algebraicznych przy zmianie numeracji niewiadomych nazywa się permutacjami. Operatorem tego przetwarzania jest macierz permutacji P – kwadratowa macierz o rozmiarze $N \times N$ (N – ilość równań), każda kolumna i każdy wiersz której zawierają tylko jedną jedynkę, reszta elementów są zera, $P^T \cdot P = I$, $B = P^T \cdot A \cdot P$, gdzie A – macierz o podanej numeracji, B – macierz o nowej numeracji, P – macierz permutacji.

➤ **Podany przykład:**

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{A}} &:= \begin{pmatrix} 11 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 21 & 22 & 23 & 0 & 25 & 0 \\ 0 & 32 & 33 & 34 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 43 & 44 & 45 & 0 \\ 0 & 52 & 0 & 54 & 55 & 56 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 65 & 66 \end{pmatrix} & P &:= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & B &:= P^T \cdot A \cdot P & B &= \begin{pmatrix} 33 & 34 & 32 & 0 & 0 & 0 \\ 43 & 44 & 0 & 45 & 0 & 0 \\ 23 & 0 & 22 & 25 & 21 & 0 \\ 0 & 54 & 52 & 55 & 0 & 56 \\ 0 & 0 & 12 & 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 65 & 0 & 66 \end{pmatrix} \\
 & & P^T \cdot P &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

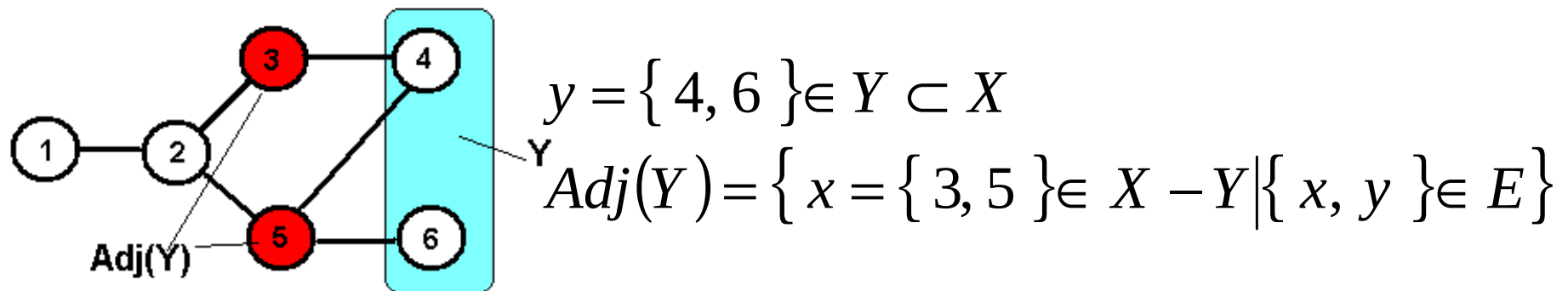
- Nazywamy dwa węzły (wierzchołki) grafu sąsiednimi, jeśli

$$\{x, y\} \in E$$

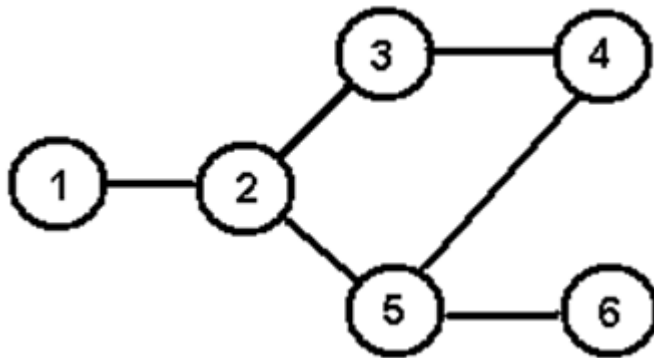
- Jeśli $Y \subset X$, to sąsiedni (przyległy) zbiór dla Y jest

$$Adj(Y) = \{ x \in X - Y \mid \{x, y\} \in E \text{ dla } y \in Y \}$$

- Przykład:



- **Struktura przyległości grafu** – to jest lista wierzchołków przyległych dla każdego wierzchołku grafu:



1	2
2	1, 3, 5
3	2, 4
4	3, 5
5	2, 4, 6
6	5

Pozycja	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Lista wierzchołków	2	1	3	5	2	4	3	5	2	4	6	5	
Wskaźnik pozycji	1	2	5	7	9	12	13						
Numer wierzchołku	1	2	3	4	5	6							

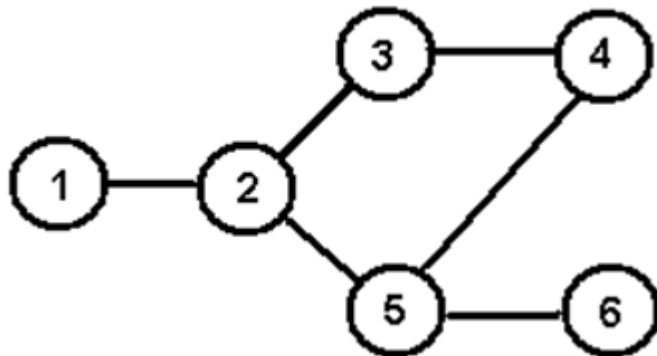
- **Ścieżką** od wierzchołku x do wierzchołku y długością L jest zbiór uporządkowany z $L+1$ różnych wierzchołków

$$(x_1, x_2, \dots, x_{L+1}), \quad x_{i+1} \in \text{Adj}(x_i), \quad 1 \leq i \leq L$$

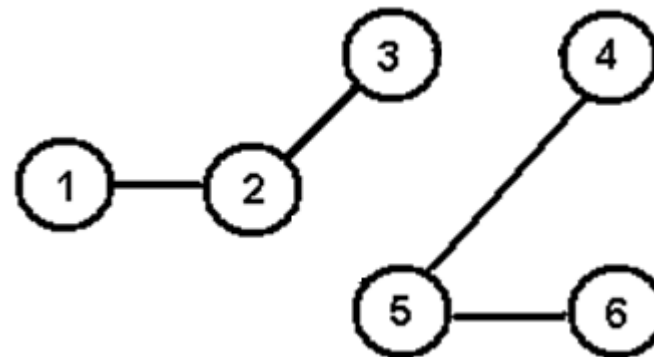
- Odległością $d(x,y)$ pomiędzy dwoma wierzchołkami grafu spójnego

$$G = (X, E)$$

jest długość najkrótszej ścieżki, która łączy te wierzchołki. Graf spójny – to taki graf, dla którego każda para wierzchołków jest łączoną przynajmniej jedną ścieżką.



Graf spójny



Graf nie spójny; składa się z dwóch składowych, każda z których jest grafem spójnym

- **Mimośród wierzchołka x :**
$$l(x) = \max\{d(x, y) \mid y \in X\}$$

Trzeba odnaleźć taki wierzchołek y grafu, że odległość $d(x, y)$ dla podanego wierzchołka x będzie największą.

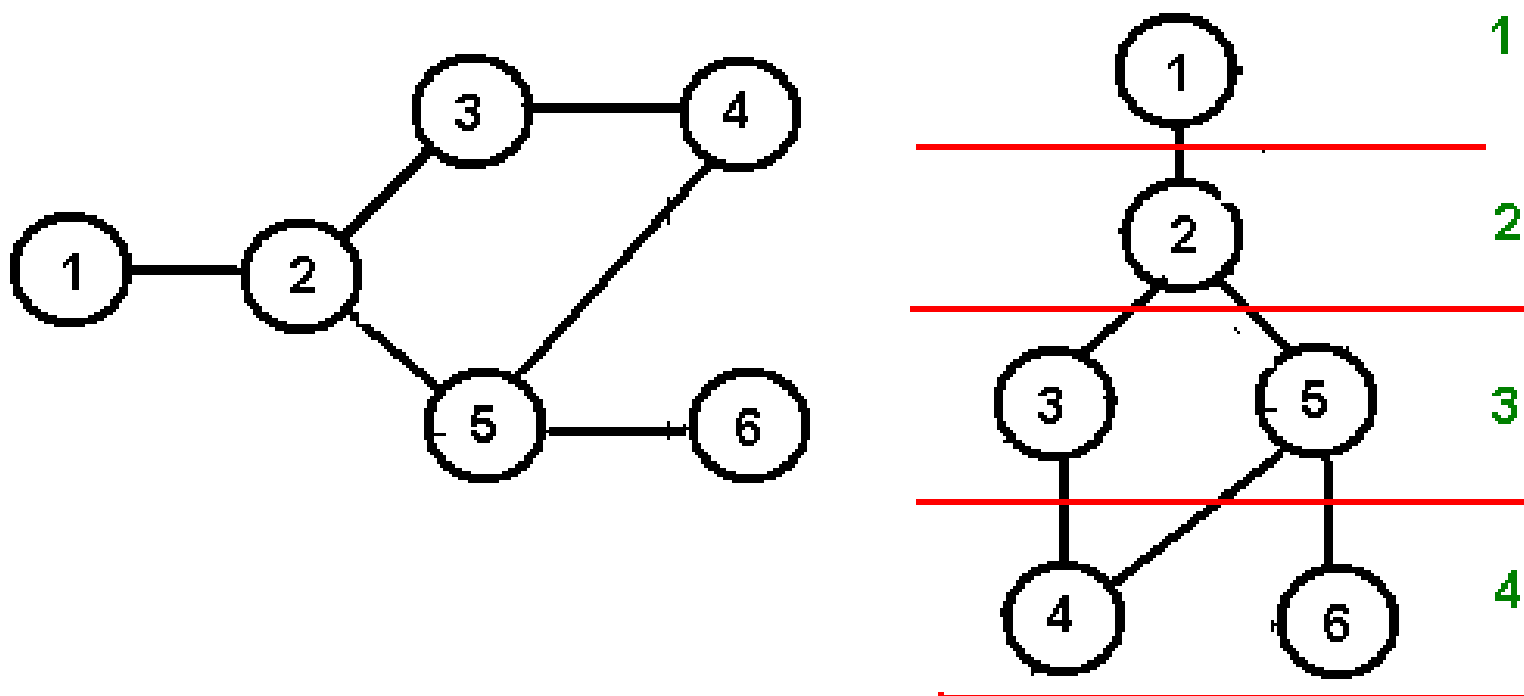
- **Średnica grafu - $\delta(G) = \max\{l(x) \mid x \in X\} = \max\{d(x, y) \mid x, y \in X\}$**

Trzeba odnaleźć taki wierzchołek x grafu, który ma największy mimośród $l(x)$.

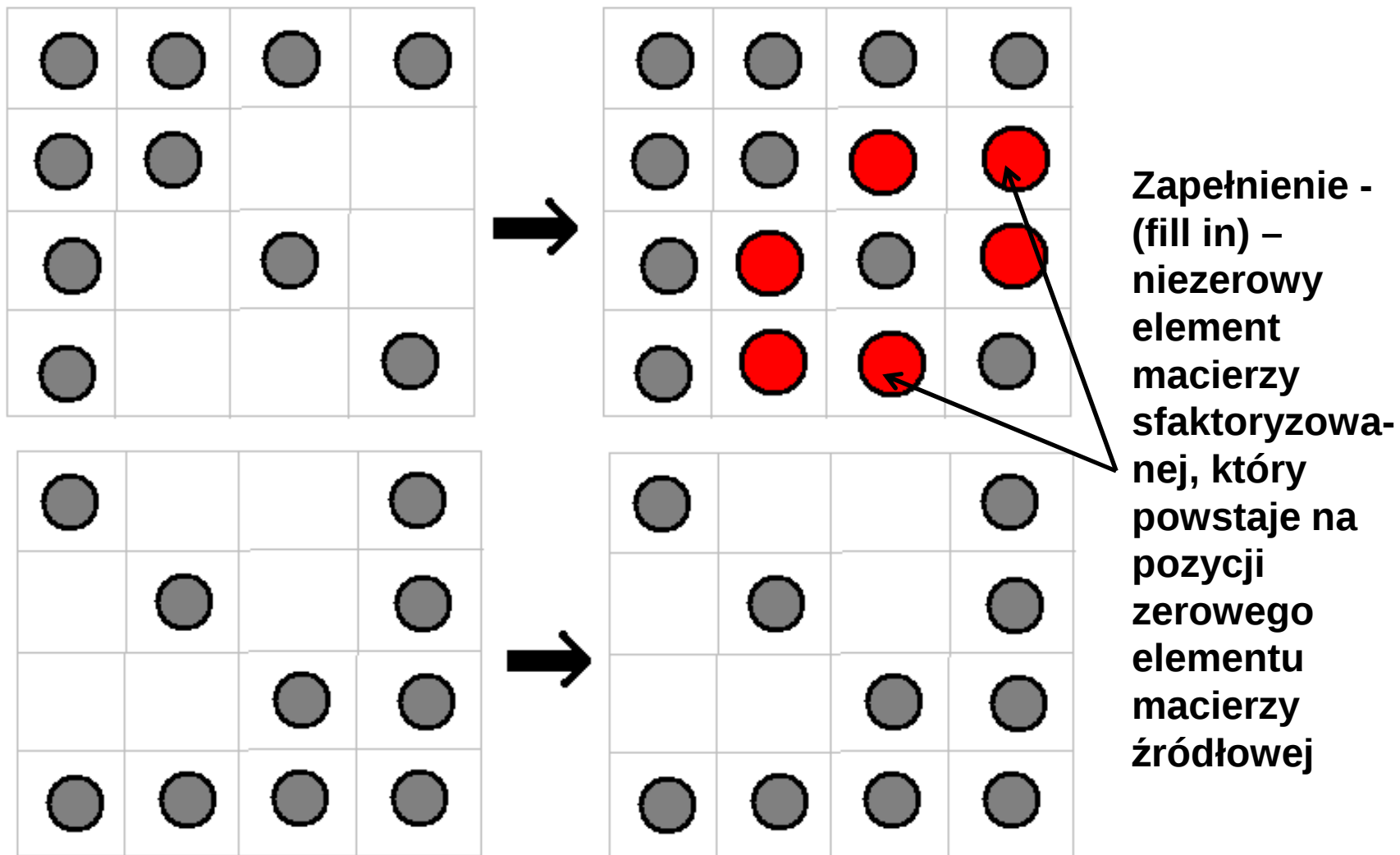
- **Wierzchołek (węzeł) peryferyjny – to taki wierzchołek, mimośród którego jest równy średnicy grafu.**

$$l(x) = \delta(G)$$

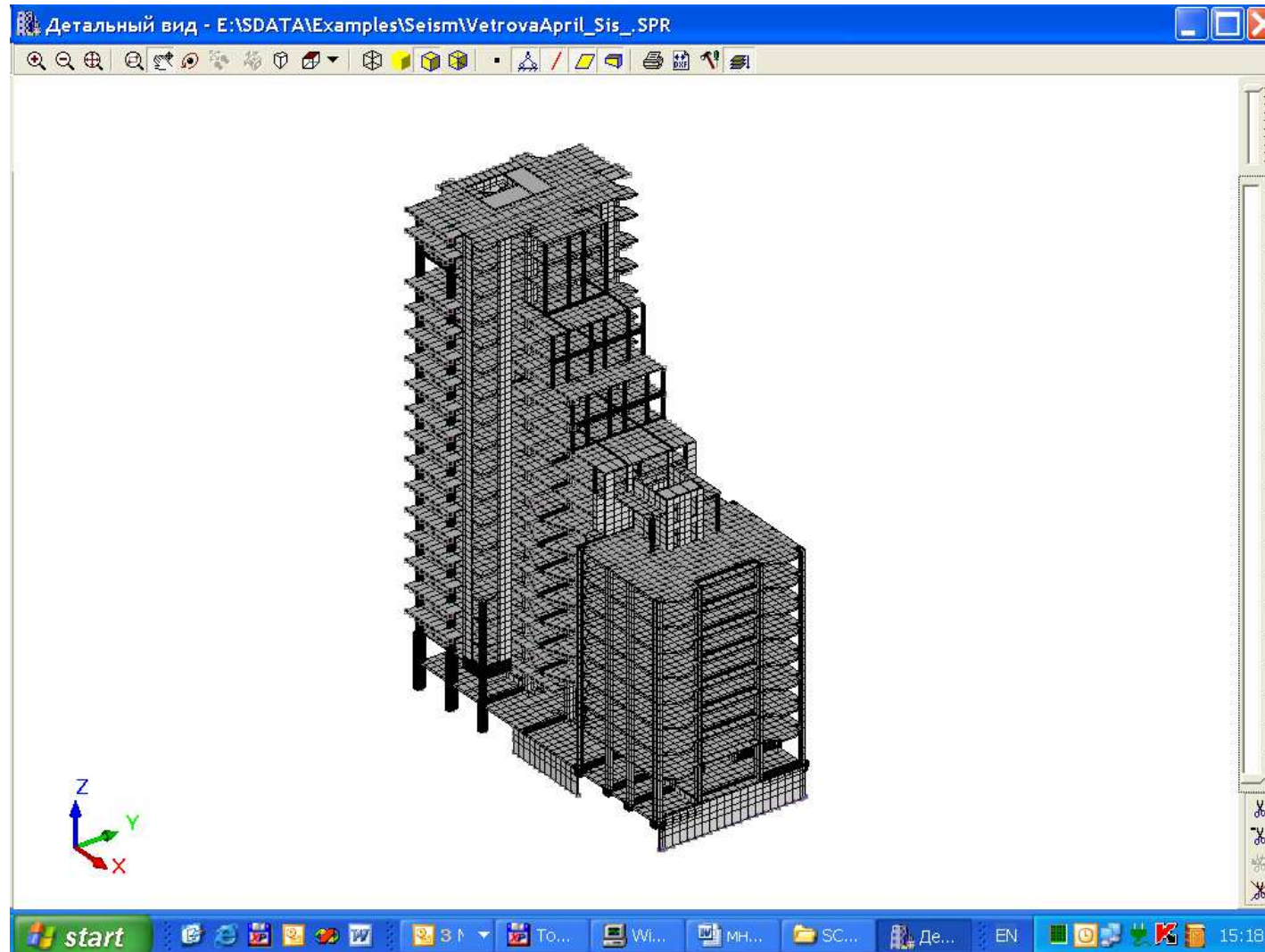
- **Struktura poziomów grafu z korzeniem w węźle pseudo peryferyjnym:**



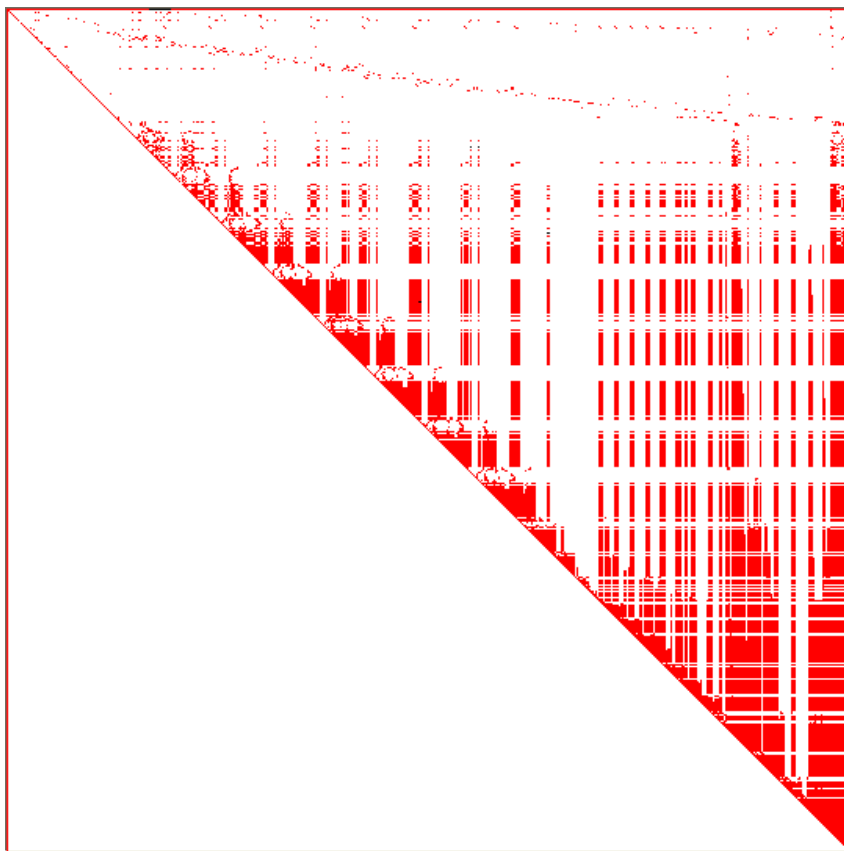
- Dla macierzy rzadkich ilość elementów niezerowych po faktoryzacji istotnie zależy od sposobu uporządkowania równań:



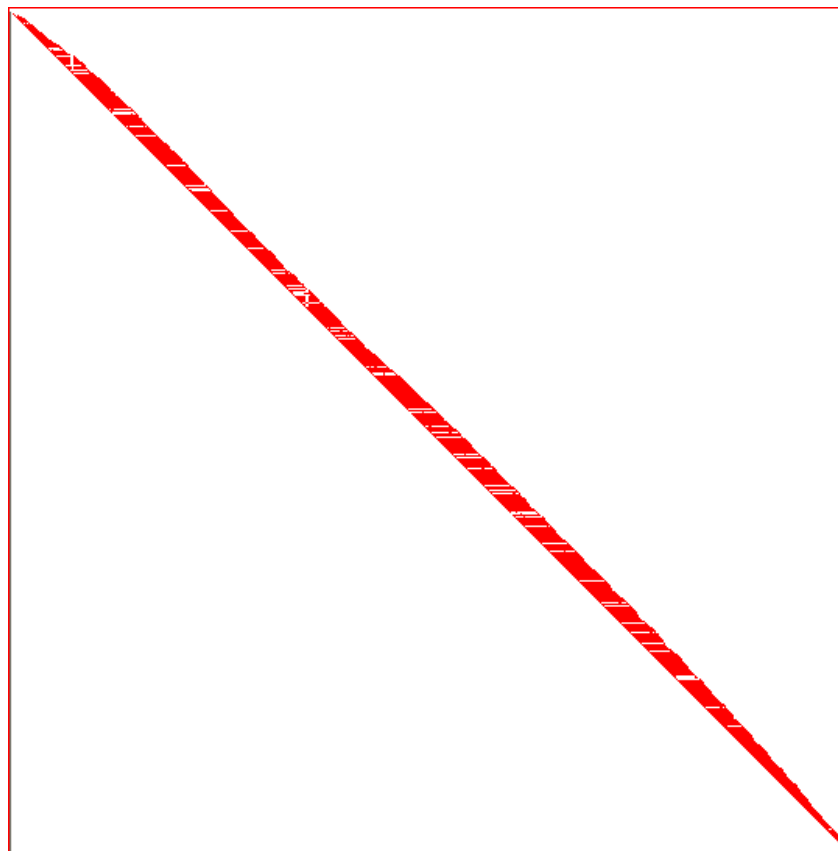
I. Reordering methods



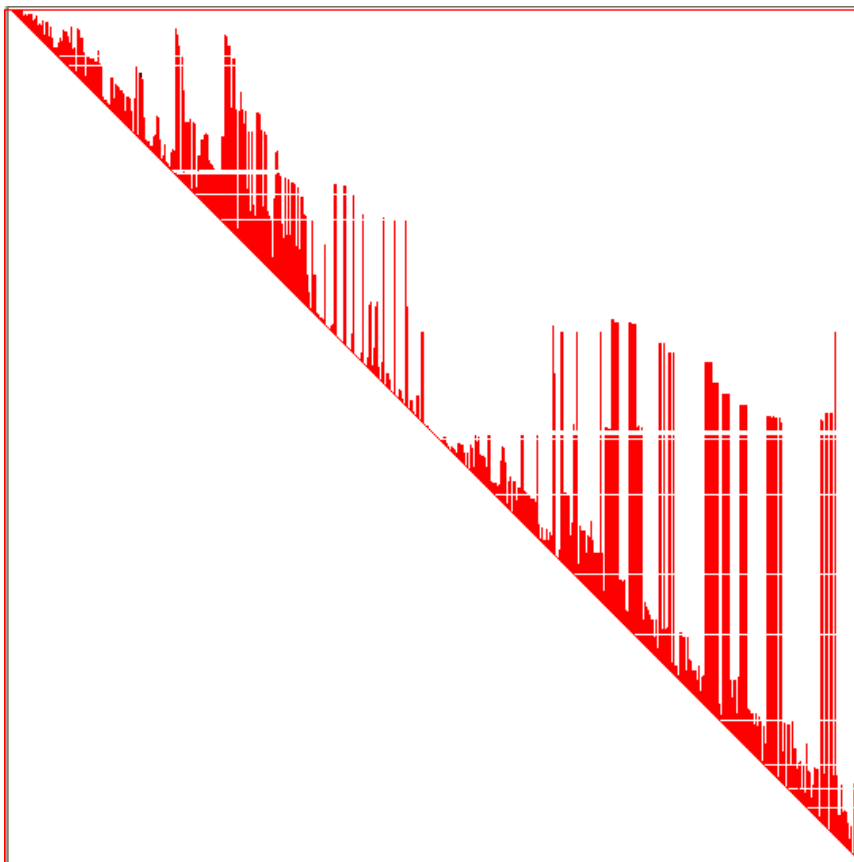
19 409 nodes, 19 456 finite elements and 115 362 equations



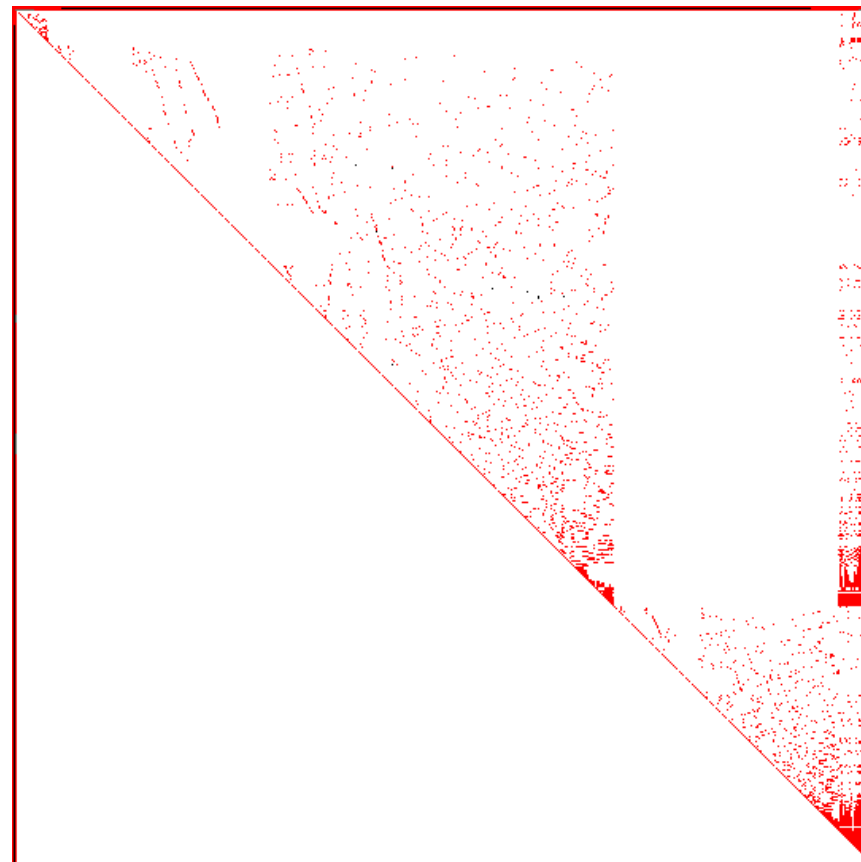
No reordering - 3 741 Mb



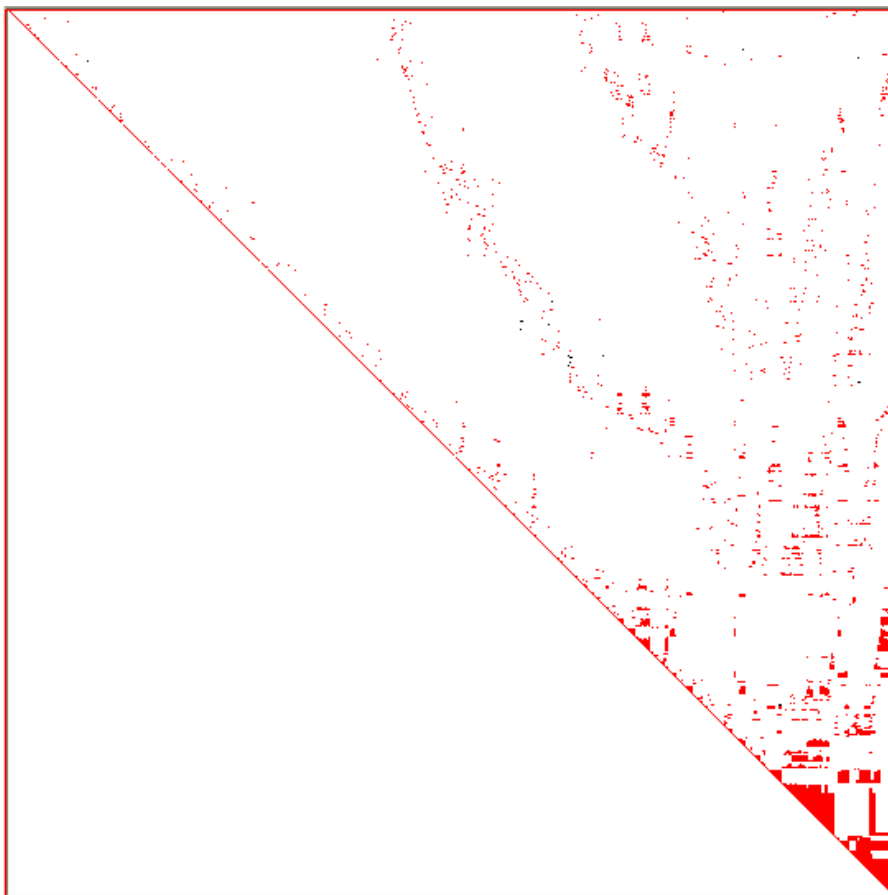
RCM - 1 618 Mb



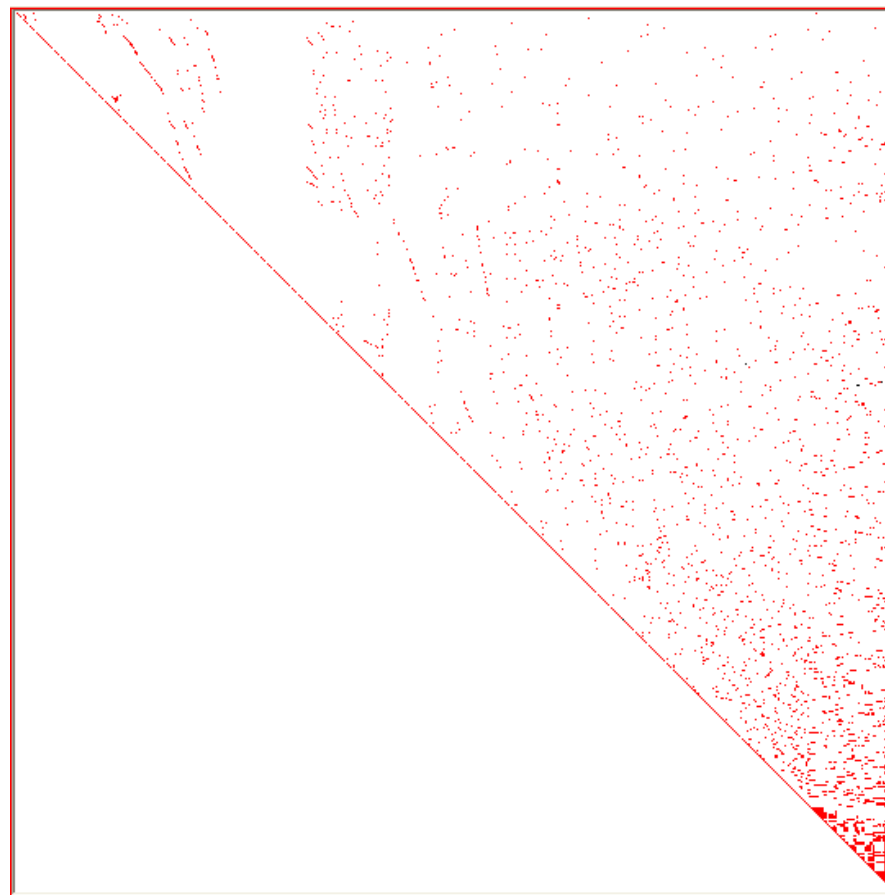
Sloan - 1 386 Mb



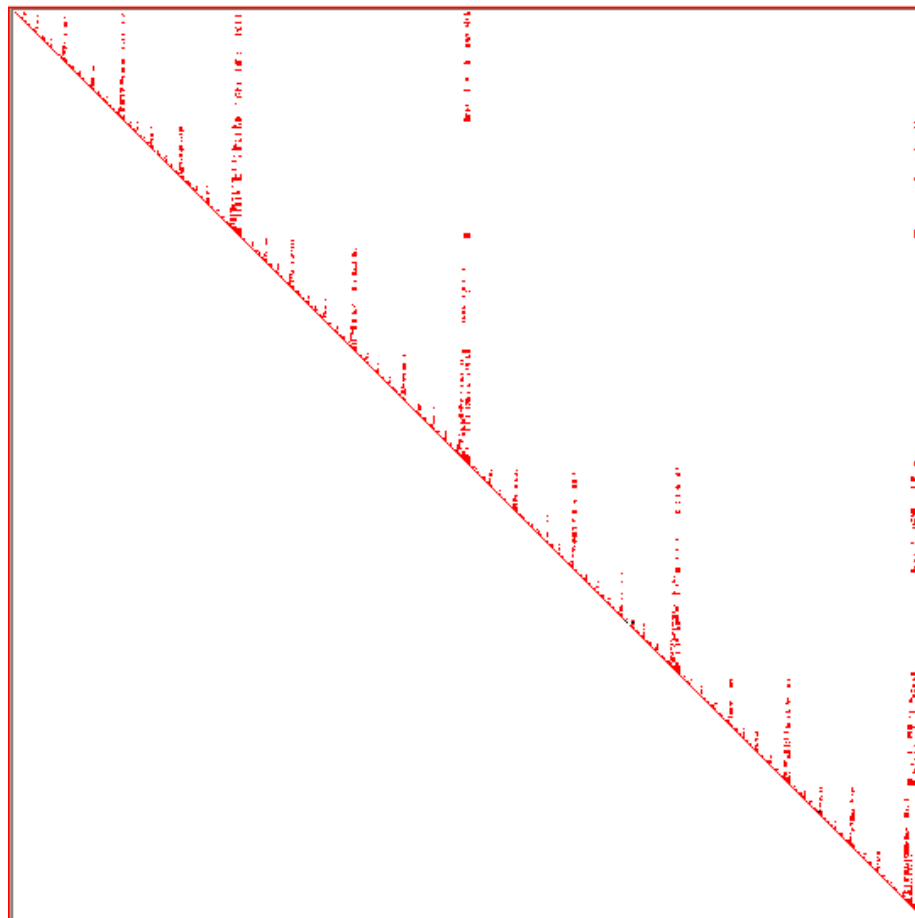
PSM+MMD - 345 Mb



ND - 644 Mb



QMD, MMD – 209 (191) Mb



Multilevel Reordering– 193 Mb

Reordering Method	Nonzero entries in factorized matrix	Size of factorized matrix, Mb
No reordering	490 366 701	3 741
RCM	212 143 113	1 618
Sloan	181 750 005	1 386
PSM+MMD	45 281 385	345
ND	84 522 753	644
QMD	27 501 777	209
MMD	25 142 373	191
Multilevel Reordering	25 341 381	193

Sposoby przechowywania macierzy rzadkich

➤ Chocza macierzy gęste nie są macierzami rzadkimi, zaczniemy od sposobów przechowywania macierzy gęstych.

1. Macierz gęsta niesymetryczna

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \\ 13 & 14 & 15 & 16 \end{pmatrix}$$

Wiersz po wiersze

$$\begin{pmatrix} 1 & 5 & 9 & 13 \\ 2 & 6 & 10 & 14 \\ 3 & 7 & 11 & 15 \\ 4 & 8 & 12 & 16 \end{pmatrix}$$

Kolumna po kolumnie

2. Macierz gęsta symetryczna dolny trójkąt

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

Wiersz po wiersze

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

Kolumna po kolumnie

3. Sposób profilowy – dolna część, wiersz po wiersze

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & & & & & & & & & & & & & \\ a_{21} & d_2 & & & & & & & & & & & & & & & \\ a_{31} & 0 & d_3 & & & & & & & & & & & & & & \\ & a_{42} & 0 & d_4 & & & & & & & & & & & & & \\ & & & a_{54} & d_5 & & & & & & & & & & & & \\ & & & a_{64} & a_{65} & d_6 & & & & & & & & & & & \\ & & & a_{74} & 0 & a_{76} & d_7 & & & & & & & & & & \\ & & & & & a_{86} & a_{87} & d_8 & & & & & & & & & \\ & & & & & & a_{97} & a_{98} & d_9 & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & d_{10} & & & & & & & \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & & & & & & & & & & & & & \\ 1 & d_2 & & & & & & & & & & & & & & & \\ 2 & 3 & d_3 & & & & & & & & & & & & & & \\ & 4 & 5 & d_4 & & & & & & & & & & & & & \\ & & & 6 & d_5 & & & & & & & & & & & & \\ & & & 7 & 8 & d_6 & & & & & & & & & & & \\ & & & 9 & 10 & 11 & d_7 & & & & & & & & & & \\ & & & & & 12 & 13 & d_8 & & & & & & & & & \\ & & & & & & 14 & 15 & d_9 & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & d_{10} & & & & & & & \end{pmatrix}$$

Struktura macierzy

pos	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Space[i]	a21	a31	0	a42	0	a54	a64	a65	a74	0	a76	a86	a87	a97	a98	0
Pos[i]	1	1	2	4	6	7	9	12	14	16	16					
Diag[i]	d1	d2	d3	d4	d5	d6	d7	d8	d9	d10						
i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10						

Dostęp do elementów macierzy: $a[ij]$ – przy $i > j$ $\text{pos} = \text{Pos}[i+1] - (i-j)$; przy $j > i$ – pobrać $a[ji] = a[ij]$

4. Sposób profilowy – dolna część, kolumna po kolumnie

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & & & & & & & & & & & & & \\ a_{21} & d_2 & & & & & & & & & & & & & & & \\ a_{31} & 0 & d_3 & & & & & & & & & & & & & & \\ & a_{42} & 0 & d_4 & & & & & & & & & & & & & \\ & & & a_{54} & d_5 & & & & & & & & & & & & \\ & & & a_{64} & a_{65} & d_6 & & & & & & & & & & & \\ & & & a_{74} & 0 & a_{76} & d_7 & & & & & & & & & & \\ & & & & & a_{86} & a_{87} & d_8 & & & & & & & & & \\ & & & & & & a_{97} & a_{98} & d_9 & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & d_{10} & & & & & & & \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & & & & & & & & & & & & & \\ 1 & d_2 & & & & & & & & & & & & & & & \\ 2 & 3 & d_3 & & & & & & & & & & & & & & \\ & 4 & 5 & d_4 & & & & & & & & & & & & & \\ & & & 6 & d_5 & & & & & & & & & & & & \\ & & & 7 & 9 & d_6 & & & & & & & & & & & \\ & & & 8 & 10 & 11 & d_7 & & & & & & & & & & \\ & & & & & 12 & 13 & d_8 & & & & & & & & & \\ & & & & & & 14 & 15 & d_9 & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & d_{10} & & & & & & & \end{pmatrix}$$

Struktura macierzy

pos	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Space[i]	a21	a31	0	a42	0	a54	a64	a74	a65	0	a76	a86	a87	a97	a98	0
Pos[i]	1	3	5	6	9	11	13	15	16	16						
Diag[i]	d1	d2	d3	d4	d5	d6	d7	d8	d9	d10						
i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10						

5. Macierzy rzadkie – dolna część, wiersz po wiersze

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & & & \\ a_{21} & d_2 & & & & & \\ & a_{32} & d_3 & & & & \\ & & a_{43} & d_4 & & & \\ & a_{52} & & a_{54} & d_5 & & \\ & & & & a_{65} & d_6 & \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} d_1 & & & & & & \\ 1 & d_2 & & & & & \\ & 2 & d_3 & & & & \\ & & 3 & d_4 & & & \\ & 4 & & 5 & d_5 & & \\ & & & & 6 & d_6 & \end{pmatrix}$$

Struktura macierzy źródłowej (dla mnożenia przez wektor)

pos	1	2	3	4	5	6	7
jnd[i]	1	2	3	2	4	5	
Space[i]	a21	a32	a43	a52	a54	a65	
Pos[i]	1	1	2	3	4	6	7
Diag[i]	d1	d2	d3	d4	d5	d6	
i	1	2	3	4	5	6	

Dostęp do elementów macierzy: dla danego i pos=Pos[i], ...,Pos[i+1]-1, j = jnd[pos]; a[ij] = Space[pos]; (j < i)

6. Macierzy rzadkie – dolna część, kolumna po kolumnie

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & & & \\ a_{21} & d_2 & & & & & \\ & a_{32} & d_3 & & & & \\ & & a_{43} & d_4 & & & \\ & a_{52} & & a_{54} & d_5 & & \\ & & & & a_{65} & d_6 & \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} d_1 & & & & & & \\ 1 & d_2 & & & & & \\ & 2 & d_3 & & & & \\ & & 4 & d_4 & & & \\ & 3 & & 5 & d_5 & & \\ & & & & 6 & d_6 & \end{pmatrix}$$

Struktura macierzy źródłowej (dla mnożenia przez wektor)

pos	1	2	3	4	5	6	7
ind[i]	2	3	5	4	5	6	
Space[i]	a21	a32	a52	a43	a54	a65	
Pos[i]	1	2	4	5	6	7	7
Diag[i]	d1	d2	d3	d4	d5	d6	
j	1	2	3	4	5	6	

Dostęp do elementów macierzy: dla danego j pos=Pos[j], ...,Pos[j+1]-1, i = ind[pos]; a[ij] = Space[pos]; (i > j)

7. Macierzy rzadkie – dolna część, kolumna po kolumnie, macierz sfaktoryzowana, uzupełnienie a_{53}

$$\begin{pmatrix} d_1 & & & & & & & \\ a_{21} & d_2 & & & & & & \\ & a_{32} & d_3 & & & & & \\ & & a_{43} & d_4 & & & & \\ & a_{52} & \tilde{a}_{53} & a_{54} & d_5 & & & \\ & & & & a_{65} & d_6 & & \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} d_1 & & & & & & & \\ 1 & d_2 & & & & & & \\ & 2 & d_3 & & & & & \\ & & 4 & d_4 & & & & \\ & 3 & 5 & 6 & d_5 & & & \\ & & & & 7 & d_6 & & \end{pmatrix}$$

Struktura macierzy sfaktoryzowanej

pos	1	2	3	4	5	6	7	8
ind[i]	2	3	5	4	5	5	6	
Space[i]	a21	a32	a52	a43	a53	a54	a65	
Pos[i]	1	2	4	6	7	8	8	
Diag[i]	d1	d2	d3	d4	d5	d6		
j	1	2	3	4	5	6		