Matrices dispersas

Damián Ginestar Peiró

Departamento de Matemática Aplicada

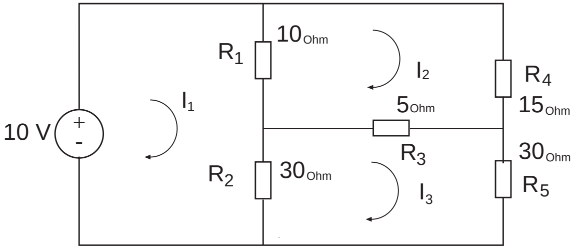
Universidad Politécnica de Valencia

Curso 2023-2024

Índice

Red eléctrica

Supongamos que se quieren determinar las intensidades que circulan par las distintas ramas de la red eléctrica



Red eléctrica

Si aplicamos las leyes de Kirchoff a las 3 mallas obtenemos

Malla 1:

$$10I_1 - 10I_2 + 30I_1 - 30I_3 = 10 \ ,$$

Malla 2:

$$10I_2 - 10I_1 + 5I_2 - 5I_3 + 15I_2 = 0 \ ,$$

Malla 3:

$$30I_3 - 30I_1 + 5I_3 - 5I_2 + 30I_3 = 10 \ .$$

$$\begin{pmatrix} 40 & -10 & -30 \\ -10 & 30 & -5 \\ -30 & -5 & 65 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \ .$$

El sistema de ecuaciones que se ha obtenido es un sistema cuya matriz es densa y sin estructura.

Ecuaciones integrales

Supongamos que se tienen una ecuación integral de la forma

$$u(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x,s)u(s)\,ds$$

Se usa una fórmula de cuadratura para aproximar la integral para una malla $\{s_j\}, j = 1, \ldots n$

$$\int_a^b h(s)\,ds = \sum_{j=1}^{n} C_j h(s_j)$$

con lo que se tiene

$$u(x) - \lambda \sum_{j=1}^{n} C_j K(x, s_j) = f(x)$$

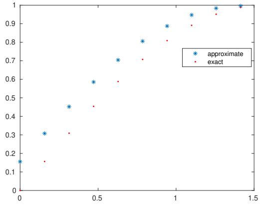
Ecuaciones integrales

Evaluando esta ecuación en los mismos puntos $x_i = s_j \; i, j = 1, \ldots, n$
Obtenemos un sistema

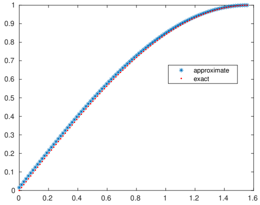
$$\boxed{\sum_{j=1}^{n} A_{i,j} u_j = f_i \;, \quad i = 1, \ldots, n,}$$

donde $A_{ij} = 1 - \lambda C_j K(x_i, x_j)$.
Para

$$u(x) = -\frac{2}{\pi}\cos(x) + \frac{4}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(x-y)u(y)\,dy$$



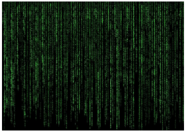
10 nodos

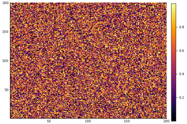


100 nodos

Matrices densas

- Las matrices densas grandes aparecen en aplicaciones como:
  - Estimación del campo gravitatorio de la Tierra.
  - Problemas de electromagnetismo (método de los momentos).
  - Problemas acústicos.
  - Simulaciones de dinámica molecular.
- La dimensión de estos problemas puede ser de 10^5 a 10^7 filas y o columnas. En estos casos se utiliza la memoria del disco para almacenar las matrices y se diseñan algoritmos 'out-of-core'.





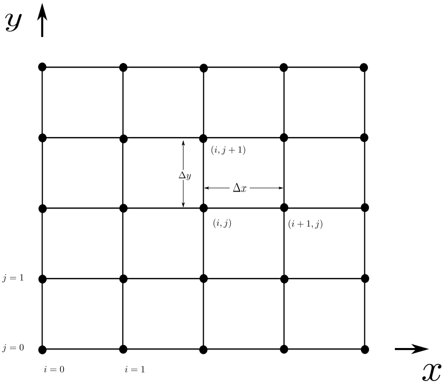
Ecuación de Poisson 2D

Supongamos ahora, que se pretende resolver un problema de la forma

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f \ , \quad (x,y) \in (0,l_1) \times (0,l_2) \ , \\ &u(x,y) = 0 \ , \quad \text{para} \ \ x=0; \ x=l_1; \ y=0; \ x=l_2 \ . \end{aligned}$$

El primer paso que realizaremos consistirá en discretizar el rectángulo $[0,l_1] \times [0,l_2]$ mediante un conjunto de nodos igualmente espaciados.

Ecuación de Poisson 2D



Mallado para un problema 2D rectangular.

$$x_i = i\Delta x \ , \quad i = 0, 1, 2, \ldots , N_x + 1 \ ,$$
$$y_j = j\Delta y \ , \quad j = 0, 1, 2, \ldots , N_y + 1 \ .$$

Ecuación de Poisson 2D

Utilizando una aproximación para las derivadas segundas, se tiene que

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

donde $u_{ij} = u(x_i, y_j)$.
La ecuación de Poisson se puede aproximar de la forma

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

Ecuación de Poisson 2D

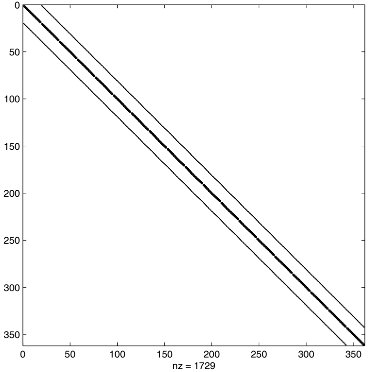
Se han de ordenar los nodos del mallado de algun modo. Una posibilidad es utilizar el orden dado por

$$l = i + n(j-1) \ .$$

Cuando se escriben las ecuaciones para $i = 1, \ldots, n$, $j = 1, \ldots, m$, y se tienen en cuenta las condicones de contorno, se obtiene un sistema de ecuaciones de la forma

$$Au = f \ ,$$

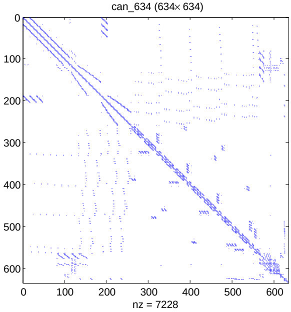
Ecuación de Poisson 2D



Matriz asociada a la ecuación de Poisson.

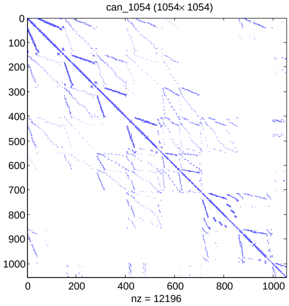
Matrix Market

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



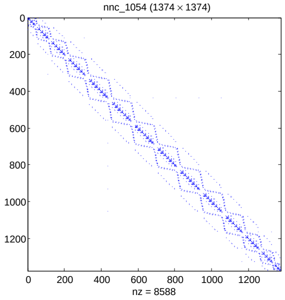
Matriz can_634 del Matrix Market.

Matrix Market



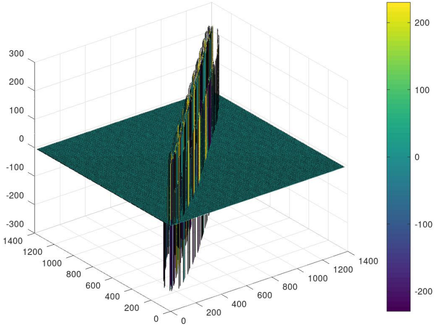
Matriz can_1054 del Matrix Market.

Matrix Market



Matriz nnc_1374 del Matrix Market.

Matrix Market



Cityplot asociado a la matriz nnc_1374 del Matrix Market. (Muestra el patrón de dispersidad y la magnitud relativa de los elementos).

Matrices dispersas

Definición

Se llama matriz dispersa a una matriz cuyos elementos la mayoría son cero.

Definición

Se dice que una matriz es dispersa cuando se puede hacer uso de técnicas especiales para sacar ventaja del gran número de elementos ceros que posee.

Matrices dispersas

- Algunos autores definen una matriz $n \times n$ como dispersa si el número de elementos no nulos se comporta como $n^{\gamma+1}$, con $\gamma < 1$.
  Valores típicos de γ son:
  - $\gamma = 0.2$ para problemas de análisis de sistemas eléctricos de generación y transporte de energía;
  - $\gamma = 0.5$ para matrices asociadas a problemas de análisis de estructuras, etc

Matrices dispersas

Hay dos tipos de matrices dispersas

- Matrices estructuradas: Los elementos no cero forman un patrón regular, por ejemplo, se agrupan a lo largo de un número pequeño de diagonales.
  Un caso especial de matrices estructuradas son las matrices banda
$$\begin{pmatrix} c_1 & d_1 & e_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ b_1 & c_2 & d_2 & e_2 & \ddots & & \vdots \\ a_1 & b_2 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_2 & \ddots & \ddots & \ddots & e_{n-3} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & d_{n-2} & e_{n-2} \\ \vdots & & \ddots & a_{n-3} & b_{n-2} & c_{n-1} & d_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & a_{n-2} & b_{n-1} & c_n \end{pmatrix}.$$
- Matrices 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 'dispersidad' de la matriz.

Formatos de almacenamiento

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

Esquema coordenado

Con este esquema, para representar la matrix A se utilizan tres vectores AA, IA, y JA de dimensión n_z. En el vector AA se almacenan los elementos no nulos de A, en IA, se almacenan los números de fila asociados a cada elemento de A y en JA el número de columna asociado a cada elemento de A.

Formatos de almacenamiento

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 0 & 5 & 0 \\ 6 & 0 & 7 & 8 & 9 \\ 0 & 0 & 10 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$$

su almacenamiento en formato coordenado viene dado por los vectores

$$\begin{aligned} AA &= \begin{pmatrix} 12 & 9 & 7 & 5 & 1 & 2 & 11 & 3 & 6 & 4 & 8 & 10 \end{pmatrix}, \\ IA &= \begin{pmatrix} 5 & 3 & 3 & 2 & 1 & 1 & 4 & 2 & 3 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}, \\ JA &= \begin{pmatrix} 5 & 5 & 3 & 4 & 1 & 4 & 4 & 1 & 1 & 2 & 4 & 3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Formatos de almacenamiento

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 (compressed sparse row).
- AA, de dimensión n_z, que contiene los elementos no nulos de A ordenados por filas,
- JA, también de dimensión n_z, que contiene los números de las columnas de los elementos de A
- IA, de dimensión $m+1$ con la siguiente estructura:

$$\begin{aligned} IA(1) &= 1 \ , \\ IA(i+1) - IA(i) &= \text{numero de elementos no nulos en la fila } i \ . \end{aligned}$$

Formatos de almacenamiento

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

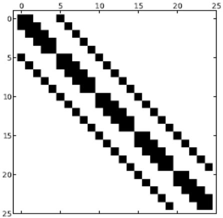
$$\begin{aligned}
AA &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 \end{pmatrix}, \\
JA &= \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 & 2 & 4 & 1 & 3 & 4 & 5 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}, \\
IA &= \begin{pmatrix} 1 & 3 & 6 & 10 & 12 & 13 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Análogamente, se puede definir un formato de almacenamiento por columnas que se llama CSC.

Formatos de almacenamiento

Esquema DIA

- 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) y un vector con los offsets (que almacena el offset de cada diagonal con respecto a la diagonal principal).

Formatos de almacenamiento

- Por convenio a la diagonal principal le corresponde el offset 0. Los valores de “i” positivos corresponden a diagonales superiores y 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

$$dat = \begin{pmatrix} * & 1 & 7 \\ * & 2 & 8 \\ 5 & 3 & 9 \\ 6 & 4 & * \end{pmatrix}, \quad off = (-2, 0, 1)$$

Formatos de almacenamiento

- Una de las librerías libre más utilizadas para el manejo de matrices dispersas se denomina SPARSKIT en FORTRAN.
  Esta librería tiene implementadas distintas funciones para la conversión de formatos:

DNS	Formato denso.
BND	Linpack Banded format
CSR	Compressed Sparse Row format
CSC	Compressed Sparse Column format
COO	Coordinate format
DIA	Diagonal format. . . .

  También hay distintas funciones para hacer operaciones básicas con matrices dispersas como la suma de matrices, la obtención de la diagonal, etc.
- En C hay otras librerías como: CSparse, Eigen y SuiteSparse. O más generales como PETSc, TRILINOS. Scipy (Python).

Producto matriz-vector

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

Esquema CSR

```
DO I=1,N
  K1=IA(I)
  K2=IA(I+1)-1
  Y(I)=DOTPRODUCT(A(K1:K2),X(JA(K1:K2)))
ENDDO
```

Producto matriz-vector

Esquema CSC

```
DO J=1,N
  K1=IA(I)
  K2=IA(I+1)-1
  Y(JA(K1:K2))=Y(JA(K1:K2))+X(J)*A(K1:K2)
ENDDO
```

Otros cálculos

Fila i de una matriz dispersa

```
vec =[];
for ii=IA(i):IA(i+1)-1
    vec(JA(ii))=AA(ii);
end
```

Columna k de una matriz dispersa

```
vec=[];
for j=1:m
  for ii=IA(j):IA(j+1)-1
    if JA(ii)==k vec(j)=AA(ii), break
    elseif JA(ii)>k break
  end
end
```

Otros cálculos

Resolución de un sistema triangular $Lx = y$ en formato CSR

```
x(1)=Y(1)
Do I=2,N
   K1=IA(I)
   K2=IA(I+1)-1
   X(I)=Y(I)-DOTPRODUCT(A(K1:K2),X(JA(K1:K2)))
END DO
```

Ejemplos de cálculo disperso

Problema de mínimos cuadrados

$$Ax = b$$

donde $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, con $n >> m$.
Una posible solución de este problema es

$$A^T A x = A^T b$$

Si la matriz A es dispersa es más conveniente la formulación del sistema $(n+m) \times (n+m)$ de la forma

$$\boxed{\begin{pmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}}$$

Grafo de una matriz dispersa

- Hay una relación directa entre el patrón de una matriz dispersa y su grafo asociado.
- Un grafo dirigido o digrafo consiste en un conjunto de nodos o vértices y aristas dirigidas entre los nodos.
- Para una matriz cuadrada A, se asocia un nodo con cada fila. Si a_{ij} es un elemento no nulo (entrada) de una matriz dispersa, hay una arista dirigida del nodo i al j.

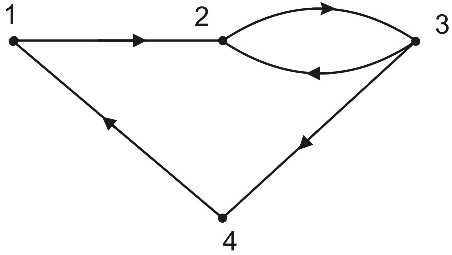
Grafo de una matriz dispersa

Ejemplo

Dada la matriz

$$\begin{pmatrix} x & x & & \\ & x & x & \\ & x & x & x \\ x & & & x \end{pmatrix}$$

tiene el grafo asociado



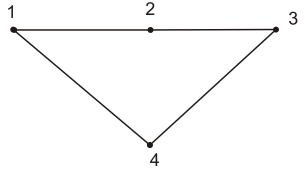
Grafo de una matriz dispersa

- Para matrices simétricas, si hay una conexión del nodo i al nodo j, se tendrá también una conexión del nodo j al i. De este modo las matrices simétricas se representan mediante un grafo no dirigido.

Dada la matriz:

$$\begin{pmatrix} x & x & & x \\ x & x & x & \\ & x & x & x \\ x & & x & x \end{pmatrix}$$

tiene el grafo asociado



Grafo de una matriz dispersa

Ejercicio:

Obtener el grafo asociado a la siguiente matriz, asumiendo que es simétrica

$$
\begin{bmatrix}
\mathbf{x} & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & \mathbf{x} & & & & & \mathbf{x} \\
& \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & \mathbf{x} & & & & & & \\
\mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & & \mathbf{x} & & & & & \\
\mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & & & & & \\
\mathbf{x} & & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & & & & & & \\
& \mathbf{x} & & \mathbf{x} & & \mathbf{x} & & & & & & \\
\mathbf{x} & & \mathbf{x} & & & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & & & \mathbf{x} \\
& & & & & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\
& & & & & & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \\
& & & & & & & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \\
& & & & & & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\
\mathbf{x} & & & & & & \mathbf{x} & \mathbf{x} & & & \mathbf{x} & \mathbf{x}
\end{bmatrix}
$$

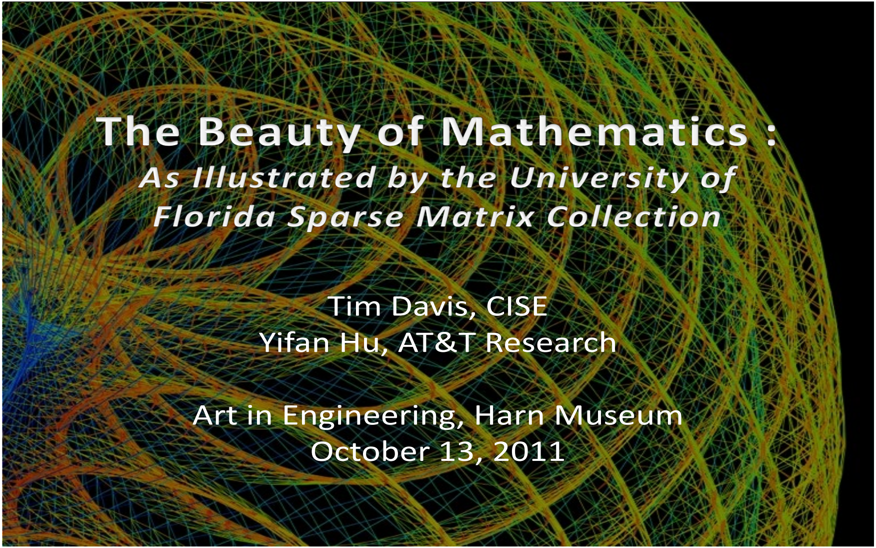
Grafo de una matriz dispersa

Algunos conceptos

- Dado un grafo $G = (V, E)$, los vecinos de un nodo i, o equivalentemente, el conjunto de adyacencia del nodo i es $\mathrm{Adj}(i) = \{j | (i, j) \in E\}$.
- La matriz de adyacencia de un grafo G es una matriz binaria $n \times n$ con $a_{ij} = 1$ si $(i, j) \in E$ y $a_{ij} = 0$ si $(i, j) \notin E$.
- El grado de un nodo i es el tamaño de su conjunto de adyacencia.

`http://faculty.cse.tamu.edu/davis/matrices.html`
`http://www.graphviz.org/`

Grafo de una matriz dispersa

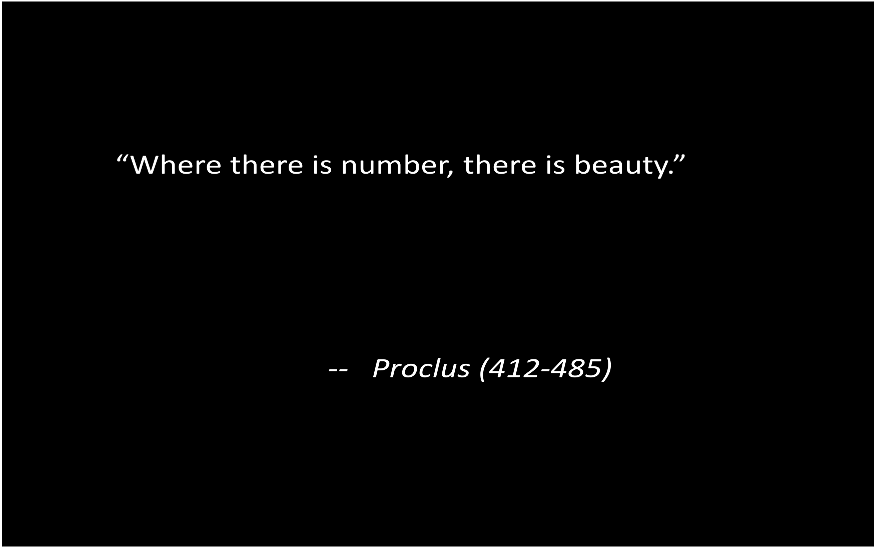


Grafo de una matriz dispersa

"Why are numbers beautiful? It's like asking why is Beethoven's Ninth Symphony beautiful. If you don't see why, someone can't tell you. I *know* numbers are beautiful. If they aren't beautiful, nothing is."

-- *Paul Erdős (1913-1996)*

Grafo de una matriz dispersa



Grafo de una matriz dispersa

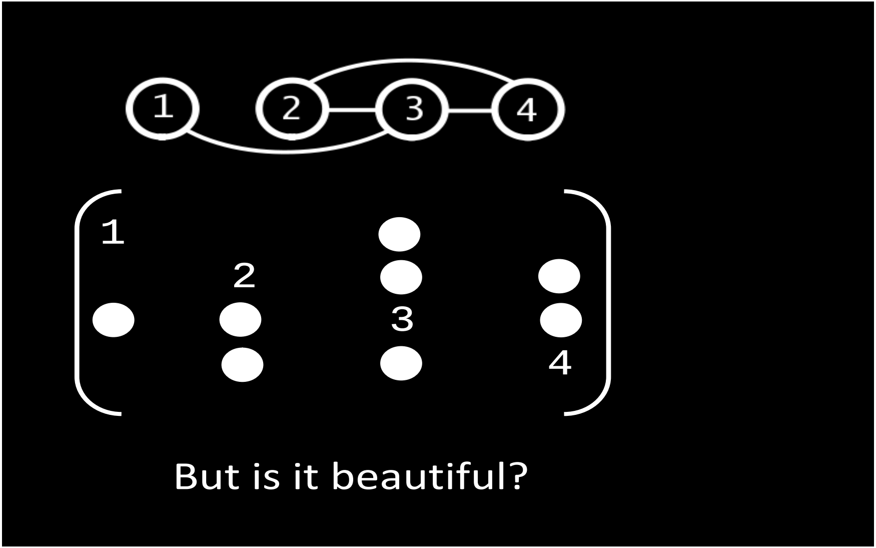
Say we have 4 equations
and 4 unknowns (w, x, y, z)

$$
\begin{array}{rcrcrcrcr}
w & & & + & 2y & & & = & 7 \\
 & & x & - & y & + & z & = & 42 \\
4w & - & x & + & 3y & - & z & = & 4 \\
 & & x & + & y & + & 2z & = & -1
\end{array}
$$

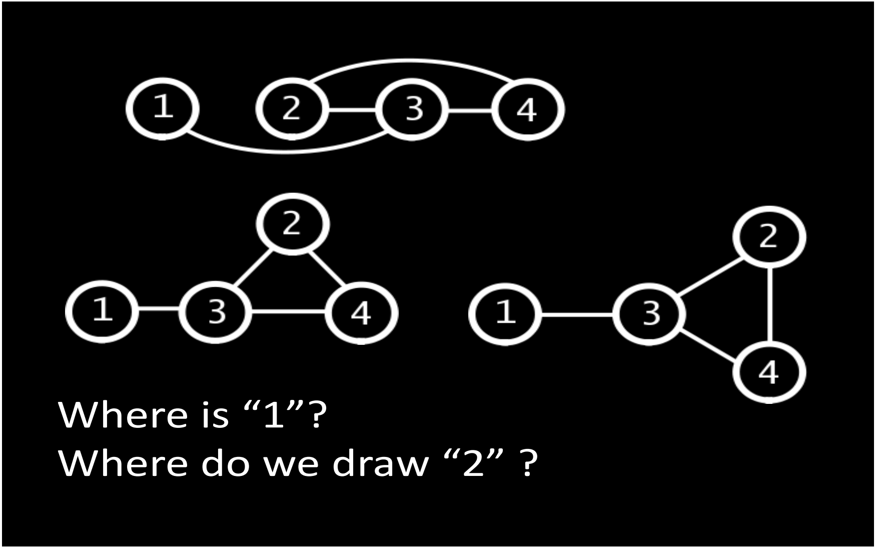
Grafo de una matriz dispersa

$$\begin{pmatrix} 1 & & 2 & \\ & 1 & -1 & 1 \\ 4 & -1 & 3 & -1 \\ & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 42 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix}$$

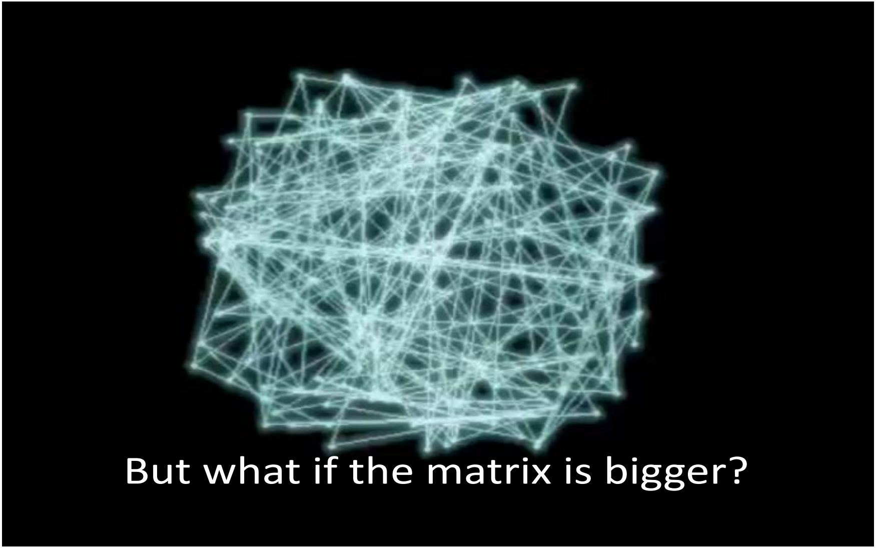
Grafo de una matriz dispersa



Grafo de una matriz dispersa



Grafo de una matriz dispersa

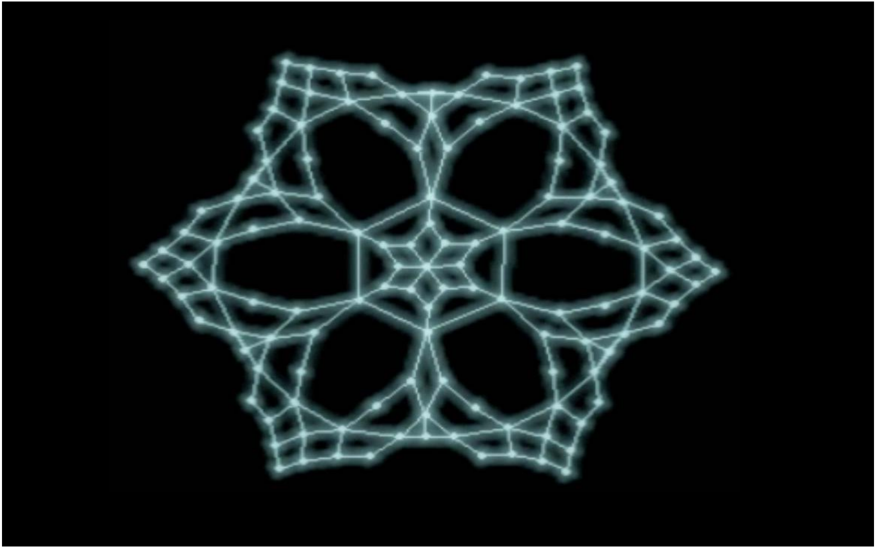


Grafo de una matriz dispersa

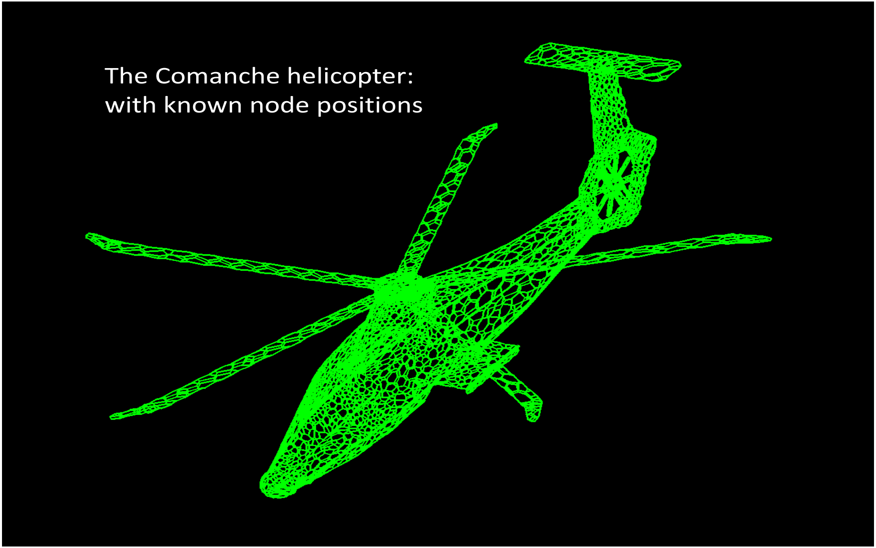
To compute aesthetically pleasing positions for the nodes, we use a physics-based computational rule:

Give each node an electrical charge. Make each edge a spring. Drop it on the floor and let it wobble until it reaches a minimum energy state.

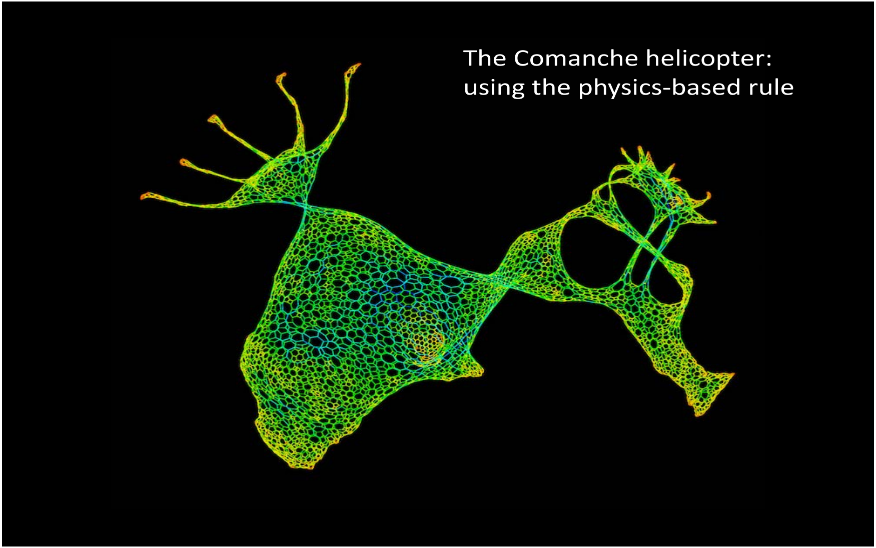
Grafo de una matriz dispersa



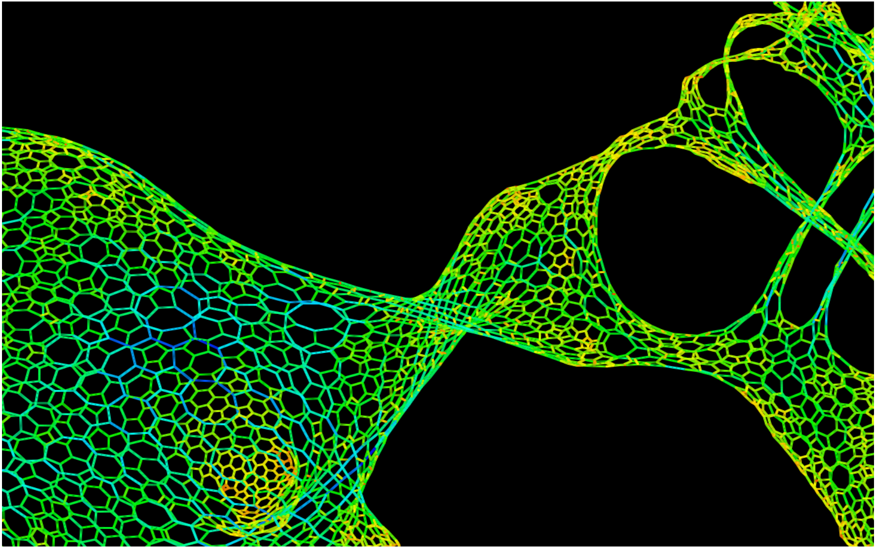
Grafo de una matriz dispersa



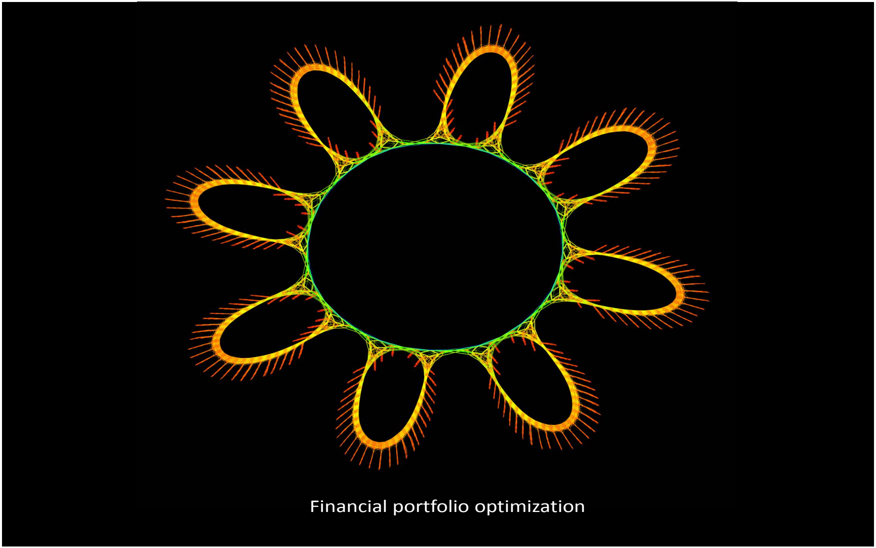
Grafo de una matriz dispersa



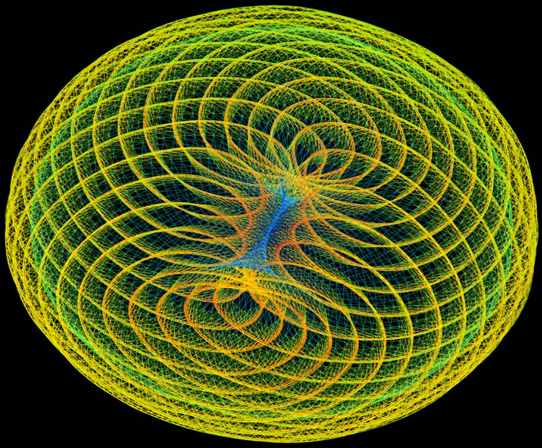
Grafo de una matriz dispersa



Grafo de una matriz dispersa

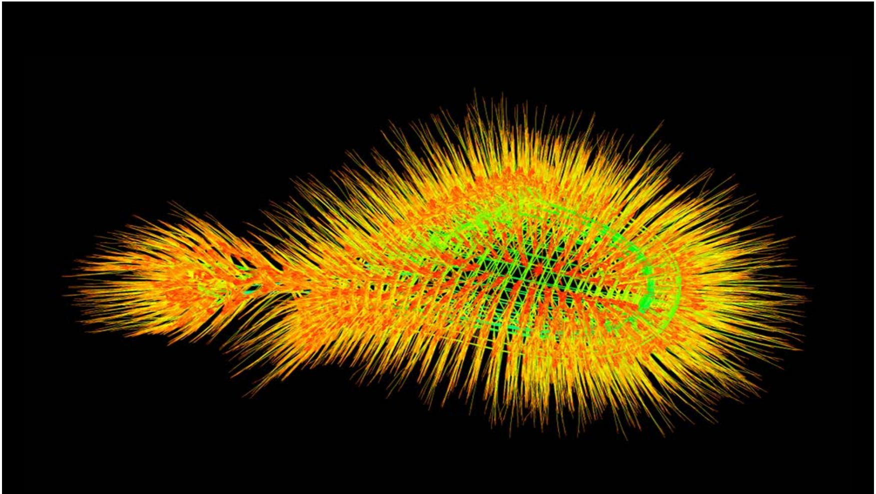


Grafo de una matriz dispersa



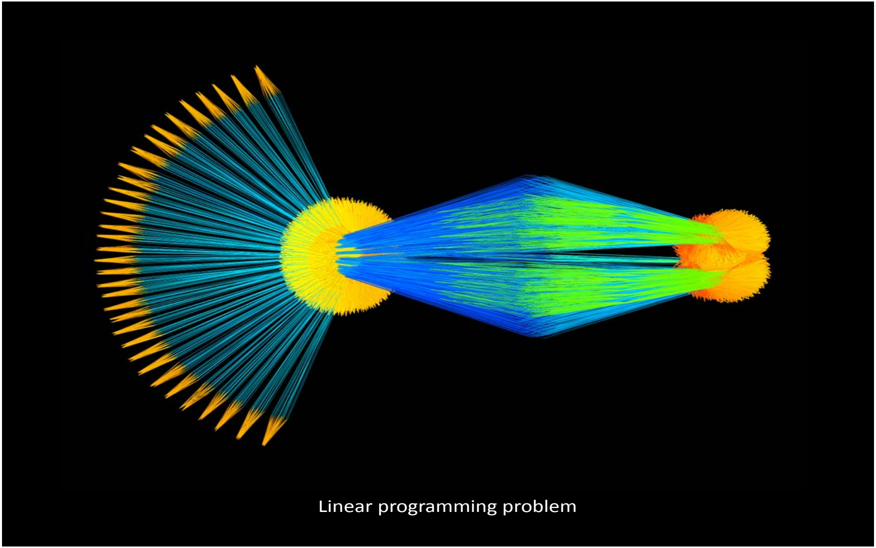
Hessian matrix from a quadratic programming problem

Grafo de una matriz dispersa

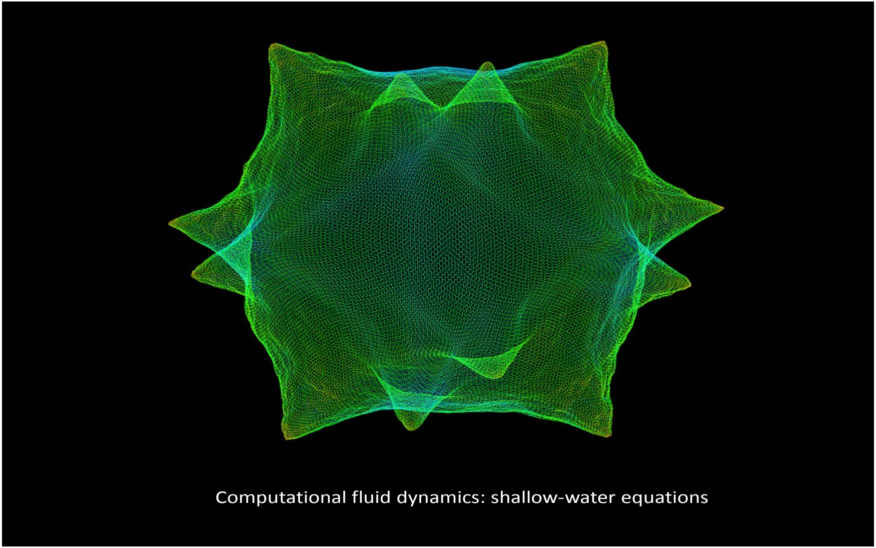


Frequency-domain circuit simulation

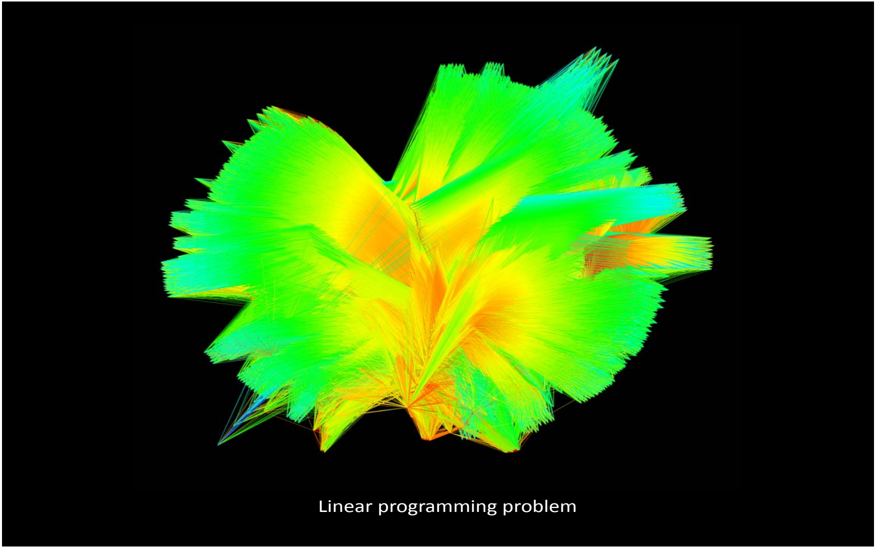
Grafo de una matriz dispersa



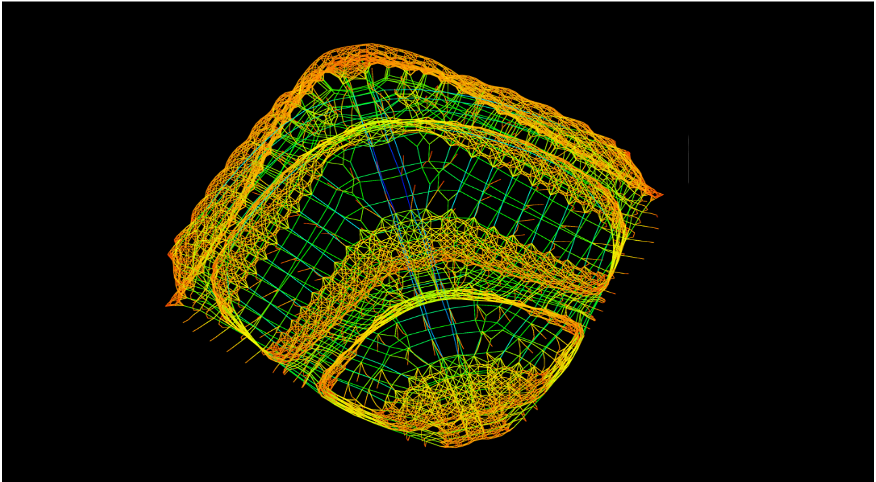
Grafo de una matriz dispersa



Grafo de una matriz dispersa

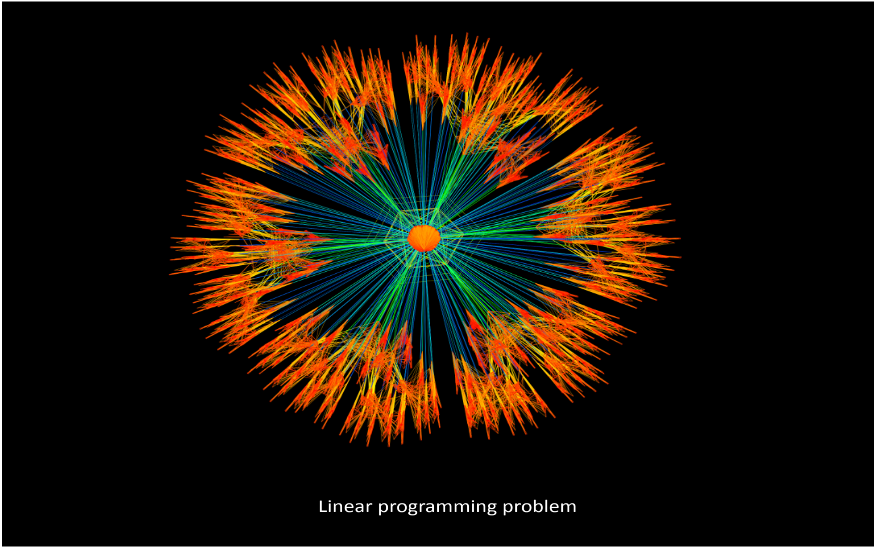


Grafo de una matriz dispersa

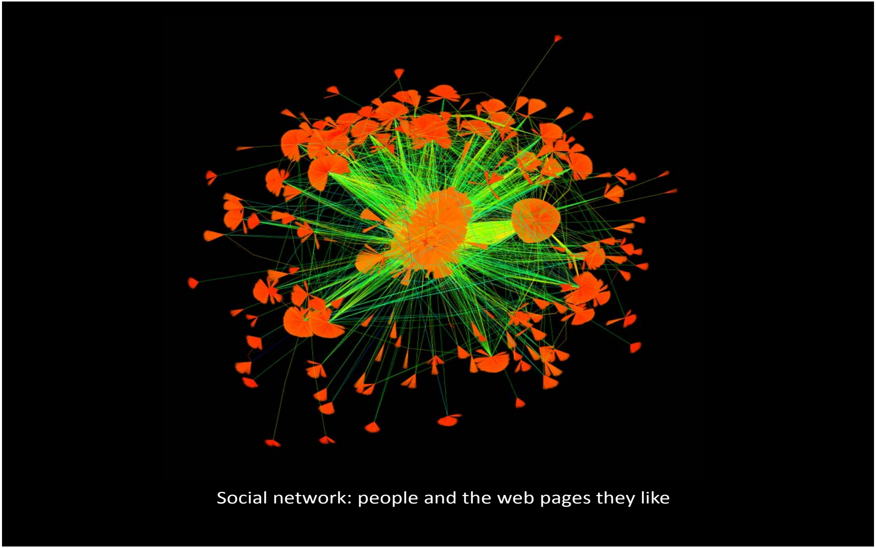


Finite-element method applied to a physical structure

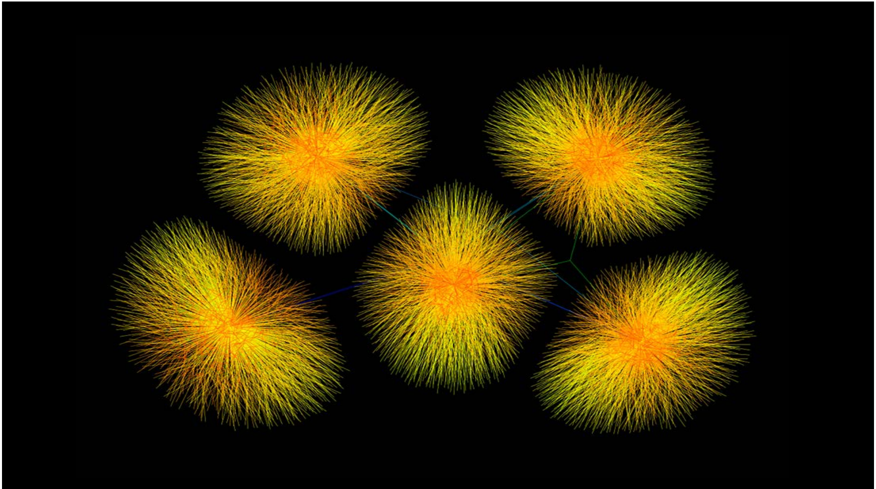
Grafo de una matriz dispersa



Grafo de una matriz dispersa

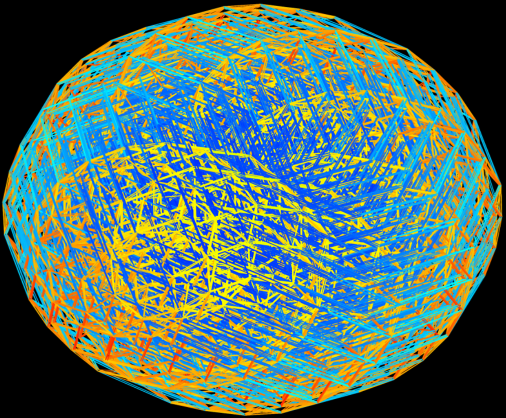


Grafo de una matriz dispersa



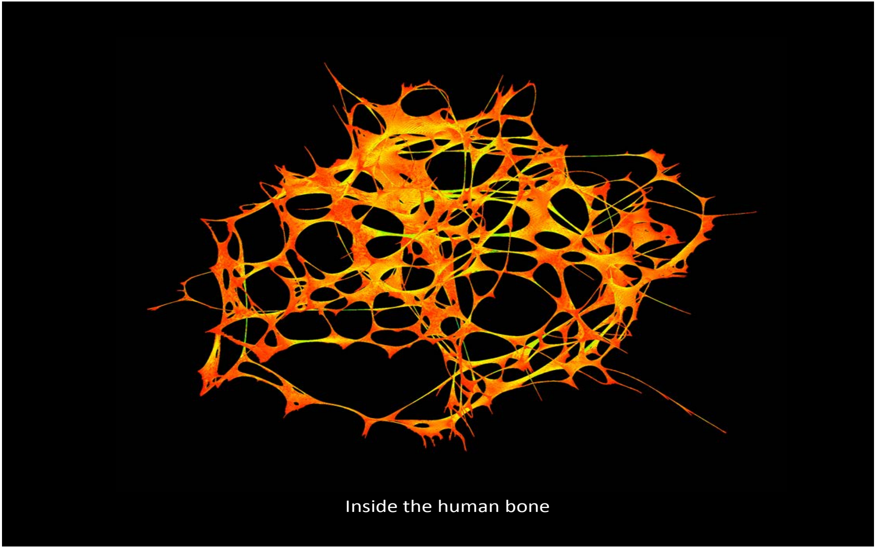
Airline crew scheduling

Grafo de una matriz dispersa

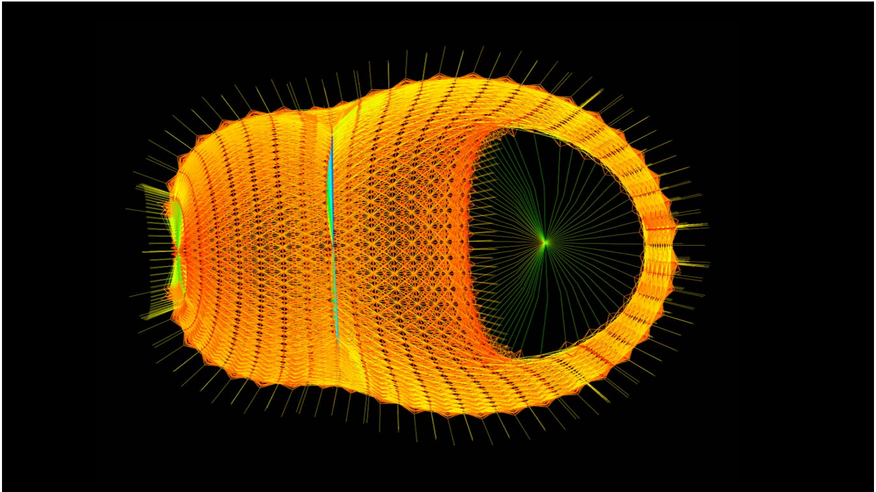


Quantum chromodynamics

Grafo de una matriz dispersa

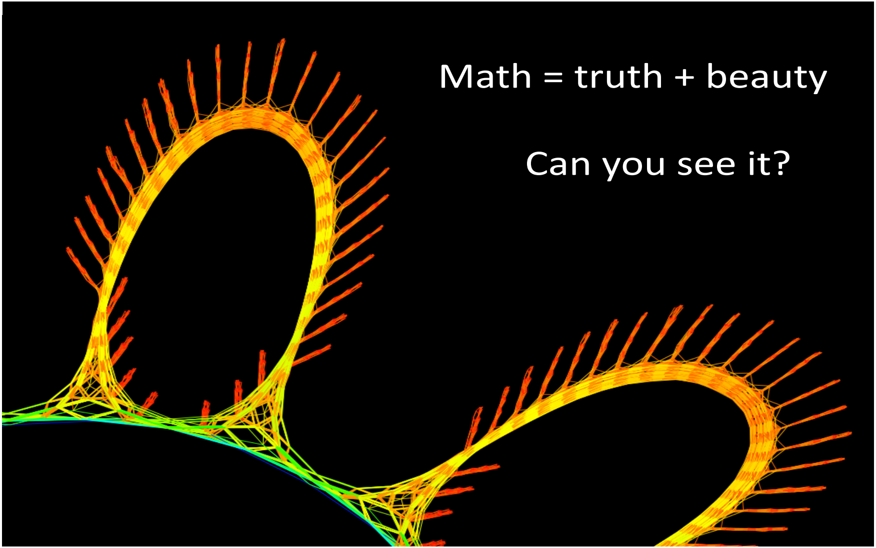


Grafo de una matriz dispersa



Galerkin finite-element discretization of 2-phase fluid flow

Grafo de una matriz dispersa



Más Información

José Román:

https://media.upv.es/player/?id=e7eb821d-fc60-d149-9202-946361f18d95

Tim Davis:

https://www.youtube.com/watch?v=7ph4ZQ9oEIc

Margot Gerritsen:

https://www.youtube.com/watch?v=8CX-Q0gtSp8

Bohemian matrices:

http://www.bohemianmatrices.com/gallery/

Simone Conradi