АЛГОРИТМИ ВПОРЯДКУВАННЯ ЕЛЕМЕНТІВ МАТРИЦЬ НЕРЕГУЛЯРНОЇ СТРУКТУРИ

СИДОРУК В.А.

Способи зберігання розріджених матриць відрізняються від тих, які використовуються для щільних матриць. Ідея зберігання розріджених матриць полягає в тому, щоб брати до уваги лише ті елементи, які мають ненульові значення або модифікуються під час розвинення матриці. Якщо кількість елементів матриці, які мають ненульові значення із самого початку, змінити не можливо, то обмежити появу нових цілком реально.

На даний момент існує цілий ряд методів, які дозволяють регулювати заповнення матриці під час розвинення шляхом упорядкування ненульових елементів. Розроблено як методи загального призначення, так і ті, що орієнтовані на матриці конкретного виду. Окрім того, у залежності від поставленого завдання та особливостей матриці, можна оптимізувати її портрет шляхом зміни ширини стрічки, зменшення профілю матриці, корегування загальної кількості заповнення, зведення структури до певного виду, наприклад, блочно-діагонального з обрамленням і т. п. Таким чином, розрізняють кілька видів оптимальності впорядкування.

Упорядкування вважається оптимальним у сенсі заповнення, якщо воно приводить до найменшого можливого заповнення. Якщо кількість операцій, які виконуються при обробці впорядкованої матриці, мінімальна, то впорядкування вважають оптимальним у сенсі витрат арифметичних операцій. Для матриці A порядку n існує $n!$ різних впорядкувань, з яких одне або більше виявляється оптимальним у сенсі заповнення і кілька впорядкувань (але не менше одного) є оптимальними у сенсі мінімізації кількості арифметичних операцій. На жаль, задача пошуку таких оптимумів надзвичайно важка і наразі ще не розроблено ефективних алгоритмів для їх отримання. Існуючі процедури є евристичними і зазвичай базуються на спробах відшукання впорядкувань, які забезпечують зниження заповнення та кількості арифметичних операцій, але не гарантують досягнення точного мінімуму цих величин.

При розробці паралельних алгоритмів з'являються нові складові оптимальності впорядкування. Так, можна вести мову про оптимальне впорядкування в сенсі міжпроцесних обмінів або в сенсі рівномірної завантаженості процесів. У цьому розумінні задача полягає в створенні такого впорядкування, яке б мінімізувало кількість даних, що пересилаються між процесами й, разом з тим, не допустило ситуації простою одних процесів у той час, коли інші завантажені роботою.

Алгоритм мінімальної степені. Якщо матриця системи симетрична й додатно визначена, але ніяких додаткових відомостей про структуру її розрідженості невідомо (наприклад, не припускається, що матриця стрічкова), то найбільш доцільно застосовувати методи, які базуються на спробах зменшити величину заповнення, яке виникатиме при розвиненні матриці. Серед таких найкращим вважається алгоритм мінімальної степені.

Алгоритм мінімальної степені є достатньо простим, економічним та ефективним. Головна ідея полягає в локальній мінімізації заповнення і числа операцій на кожному кроці виключення за рахунок вибору головного елемента в тому рядку або стовпчику, де забезпечується внесення найменшого числа ненульових елементів у трикутні множники. Теоретичною базою надійності є твердження, що будь-який діагональний елемент a_j при $i>к$ задовольняє умову стійкості і тому може бути використаний як $к$-й головний елемент.

В основі алгоритму лежить наступне спостереження. Нехай вже перетворено перші i-1 рядків та стовпчиків матриці і вони далі не змінюватимуться. Для зменшення кількості ненульових елементів i-го стовпчика в ще не факторизованій підматриці на місце i-го стовпчика потрібно перевести стовпчик з найменшим числом ненульових елементів. Тобто, у ході мінімізації заповнення матриці A на i-му кроці алгоритму в активній підматриці, утвореній рядками матриці $A(i)$ *з* i*-го* по n*-й*, відбувається пошук рядка (або стовпчика) з найменшою кількістю ненульових елементів і перестановка цього рядка (або стовпчика) з i-м, а відповідного стовпчика (або рядка) - з i-м, перед тим, як перейти до i-го кроку виключення, тобто побудови наступного графу виключення.

Недоліком алгоритму мінімальної степені є те, що неможливо передбачити об'єм пам'яті, яка знадобиться в ході обчислень, тому існує ряд модифікацій, які враховують цей фактор. З іншого боку, з розвитком комп'ютерної техніки актуальність проблем з пам'яттю значно знизилася, а схема викладеного алгоритму достатньо проста. До того ж, на відміну від багатьох модифікацій, тут є можливість одночасної побудови упорядкування й портрету матриці, а також знаходження числових значень у в одному і тому проходженні.

Алгоритм вкладених перерізів. Як уже зазначалося, алгоритм мінімальної степені є одним з кращих, які мінімізують заповнення матриці. Найсерйозніший недолік методу - непередбачувані й нерідко великі запити до пам'яті комп'ютера. У випадках, коли цей ресурс має критичне значення, доцільно використовувати інші способи. Серед методів, які висувають мінімальні вимоги до пам'яті, найкращими є модифікації алгоритму вкладених перерізів.

Суть алгоритму вкладених перерізів полягає в систематичному розбитті графа матриці за допомогою розділювачів. Після того, як розділювач знайдено, його вершини помічаються і видаляються з графу, в результаті чого граф «перерізається» на дві (або більше) зв'язні компоненти. Потім знаходяться розділювачі для кожної зв'язної компоненти і процедура продовжується, формуючи все менші і менші перерізи, які «вкладаються» до графу. Коли всі вершини графу стануть пронумерованими, виконання процедури закінчується. Після цього здійснюється відповідна перестановка стовпчиків та рядків матриці.

Роботу алгоритму можна покращити, якщо використати результати деяких спостережень. Так, розділювачі краще вибирати так, щоб вони мали невелику кількість вершин, оскільки в такому випадку області матриці, де виконуватиметься заповнення, стануть великими. Зручно також, щоб множини, які ми отримуємо при введені кожного розділювача, мали порівнюваний розмір. У цьому випадку, як правило, формуються розбиття кращої якості. Рівність розмірів блоків стає особливо актуальною при паралельній реалізації алгоритму вкладених перерізів. Найкраще розпаралелюються обчислення саме у тому випадку, якщо розміри діагональних блоків приблизно однакові, а їхня кількість складає $(p-1)s+1$, , де p − кількість процесів, s − деяке натуральне число.

Алгоритм паралельних перерізів. Ідея методу паралельних перерізів полягає в наступному. Розріджена матриця *A* інтерпретується як граф, кількість вершин якого дорівнює порядку матриці. При цьому, вершини *i* та *j* зв'язані ребром, якщо елемент *A(i,j)* ненульовий. Для нового впорядкування елементів знаходимо периферійну вершину і йдучи графом з певним кроком паралельно «перерізаємо» його на окремі частини. Кожна така частина утворить блок у новій матриці, а ті вершини, що знаходилися на лініях перерізу, потраплять у обрамлення.

У результаті роботи алгоритму портрет матриці набуде характерного блочно-діагонального виду з обрамленням. Розмір кожного діагонального блоку дорівнює кількості вершин відповідного блоку структури рівнів графа, а кількість рядків (стовпчиків) обрамлення рівна сумі кількості вершин усіх розділювачів. Така структура матриці є досить привабливою для використання в паралельних обчисленнях, оскільки при розподілі даних, коли кожен окремий блок міститься цілком в одному процесі, можна досягнути суттєвого зменшення міжпроцесорних обмінів.

Отже, на даний час розроблено ряд методів, призначених для такого впорядкування ненульових елементів розрідженої матриці, яке дає можливість шляхом перестановок рядків та стовпчиків модифікувати та зменшити заповнення матриці. В залежності від розстановки пріоритетів можливе проведення оптимізації різного сенсу: зменшення заповнення, зменшення кількості арифметичних операцій, покращення збалансованості процесів.