51.811
726

稀 疏 矩 阵

——算法及其程序实现

杨绍祺 谈根林 编著

高等教育出版社

内容简介

本书较全面的介绍了在求解非线性代数方程组、非线性微分方程组和非线性优化等问题时所产生的稀疏线性化代数方程组的稀疏矩阵算法，着重介绍近几年来国内外在这方面取得的一些主要成果，包括数据结构、算法及其程序实现。全书共分十章，即：绪论，线性代数方程组的解法，矩阵分解，存贮稀疏矩阵的几种数据结构，选主元的策略和模拟定序算法，具有对角优势的结构对称的稀疏线性化代数方程组的解法，非对称稀疏线性化方程组的解法，非对称时变稀疏线性化方程组的解法，对称变带宽稀疏线性方程组的解法，稀疏矩阵算法在线性规划、电子线路分析和非线性优化问题中的应用。书中给出了详细的算法及框图，便于读者直接借鉴使用。每章后面附有习题。

本书内容较新，且较实用。第七、八章有作者实际工作的成果。

本书可供电力与电子技术、流体力学、结构分析、遗传学理论、数学规划等专业和科学技术领域的师生及科技人员参考。

稀疏矩阵

——算法及其程序实现

杨绍祺　谈根林　编著

*

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

北京印刷三厂印装

*

开本 850×1168 1/32　印张 14.25　字数 340,000

1985 年 1 月第 1 版　1985 年 1 月第 1 次印刷

印数 00,001—6,600

书号 15010·0545　　定价 3.60 元

前　言

在网络理论、计算机辅助设计、电力系统优化设计、数学规划、结构分析、微分方程数值解、遗传学理论、图论等等科学技术和工程领域中都有稀疏矩阵问题，因此，很多科学家在研究稀疏矩阵算法及其的应用，稀疏矩阵算法已发展为计算数学的一个分支，而稀疏线性化代数方程组解法是稀疏矩阵算法中目前比较引人注目的课题。这种稀疏线性化代数方程组来源于求解非线性代数方程组、非线性微分方程组、非线性优化等问题，并且是求解这类问题的关键之一。本书着重介绍近几年来国内外在这方面取得的一些主要成果——稀疏矩阵的数据结构、算法及其程序实现。全书共十章，在第七和第八章中有作者的工作。现将各章内容概述如下：

第一章介绍稀疏矩阵的定义，科学技术和工程中的稀疏矩阵问题、稀疏矩阵算法方面的研究动向。

第二章和第三章通过介绍线性代数方程组的一些基本算法，逐渐引出稀疏矩阵算法。第二章介绍解线性代数方程组的直接法和迭代法，即高斯消去法，柯朗消去法，高斯-约当消去法，全主元原位消去法，高斯-赛德尔迭代法，松弛法。第三章介绍矩阵分解法。分解矩阵的方法很多，本书主要介绍三种方法，即逆矩阵的 n 因子和 $2n$ 因子乘积形式，三角化分解法，全主元原位分解法。

第四章至第八章介绍稀疏线性化代数方程组的解法。第四章介绍存贮稀疏矩阵的几种数据结构及其优缺点。第五章介绍选主元方法和模拟定序算法。第六章在系数矩阵为结构对称和具有对

角优势的假定下，介绍了稀疏线性化代数方程组的解法，包括 **LU** 分解法、符号 **LU** 分解法及产生 Fortran 代码的方法。第七章介绍不对称非时变稀疏线性化代数方程组的原位 $\mathbf{L}_*\mathbf{U}_*$ 分解法，此法采用双链表数据结构，一般不重选主元；必要时也可重选主元。第八章介绍不对称时变稀疏线性化代数方程组的解法，此法采用线性表数据结构，可根据需要随时重选主元。

第九章介绍对称变带宽稀疏线性方程组的解法。

最后一章介绍上述稀疏矩阵算法在线性规划、电子线路分析和非线性优化问题中的应用。

此外，每章后面均有习题，以帮助读者加深理解所学内容和应用学得的知识。书末还附有参考文献，供读者进一步学习和研究。

本书是杨绍祺、谈根林两人合写的，谈根林写第四章到第七章以及第九章，杨绍祺写其余五章。最后由谈根林完成文字润色工作。

由于水平所限，编著时间较为仓促，谬误在所难免，恳请读者批评指正。

作者

1982 年 3 月于北京

目　录

此为试读，需要完整PDF请访问： www.ertongbook.com

第一章　引　　论

1.1　何谓稀疏矩阵

在许多科学技术和工程问题中，需要求解线性代数方程组

$$\mathbf{Ax}=\mathbf{B} \tag{1.1.1}$$

其中，$\mathbf{A}$ 是 $n\times n$ 非奇异方阵，$\mathbf{x}$、$\mathbf{B}$ 是 n 维向量。

在许多实际问题中，矩阵 $\mathbf{A}$ 的元素内含有大量零元，非零元的个数比零元的个数少得多。例如，在电力系统计算中，导纳矩阵的每行每列的非零元平均不超过 4 个，因此，这种导纳矩阵内的非零元的个数，大致与节点数成正比，系统越大，导纳矩阵的稀疏程度越大：50 个节点的系统，零元占 92%，100 个节点的系统，零元占96%，500 个节点的系统，零元占 99%。在偏微分方程数值解中，如用 5 点差分格式求拉普拉斯方程在矩形域 G 内的数值解，系数矩阵的每行每列至多有 5 个非零元。因此，区域 G 越大，节点数越多，矩阵的稀疏程度也越大。在电路分析中，也有类似情况，例如，用改进节点法建立电路方程时，其系数矩阵的每行每列中非零元的个数平均 4 到 6 个，所以，这种矩阵也是极其稀疏的。

我们称上述零元素占优势（比如占 80% 以上）的矩阵为稀疏矩阵，而相应的线性方程组叫稀疏线性方程组。

这类大型稀疏线性方程组的求解，不能直接采用通常适于满矩阵的高斯消去或 LU 分解（参看第二、三章）方法，这是因为：

（1）由于矩阵阶数大，若存贮整个矩阵，将占存贮量太大，甚至存不下。因此需要特殊的存贮方案，即仅存非零元，而不存零

8610235

元。

(2) 随之而来的是在高斯消去或 LU 分解过程中仅对非零元进行操作。

(3) 更为重要的是，要设法在消去过程中尽可能保持矩阵的稀疏性(见第五章)。

这些问题表明，虽然方程组(1.1.1)的求解，在线性代数中早已有标准解法，但对于稀疏矩阵，却有其特殊性，需要专门的研究。

稀疏矩阵按其零元分布状况分为结构对称的稀疏矩阵和结构不对称的稀疏矩阵，例如，不含受控源的网络的节点导纳矩阵就是结构对称的，而含有受控源的网络的节点导纳矩阵一般说来是不对称的。

若稀疏矩阵的对角元的数值的绝对值比该行(或该列)非零元的绝对值为大，则称该稀疏矩阵具有对角优势，例如电阻网络的节点导纳矩阵，以及拉普拉斯方程数值解中的系数矩阵都具有对角优势。

例 1.1.1 在矩形区域 G 上，用五点差分格式求拉普拉斯方程数值解。假定区域 G 被分成 $l\times m$ 块，如图(1.1.1)所示，则矩

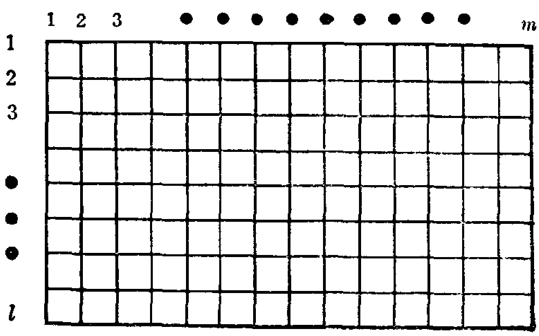

图 1.1.1 等距差分网络

阵 **A** 具有如下形式：

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

$$
\mathbf{A}=\begin{bmatrix}
\mathbf{T} & -\mathbf{I} & & & & \\
-\mathbf{I} & \mathbf{T} & -\mathbf{I} & & & \\
 & \mathbf{I} & \mathbf{T} & \ddots & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & & & \ddots & \mathbf{T} & -\mathbf{I} \\
 & & & & & -\mathbf{I} & \mathbf{T}
\end{bmatrix} \tag{1.1.1}
$$

其中

$$
\mathbf{T}=\begin{bmatrix}
4 & -1 & & & \\
-1 & 4 & -1 & & \\
 & -1 & 4 & \ddots & \\
 & & \ddots & \ddots & -1 \\
 & & & -1 & 4
\end{bmatrix}
$$

$\mathbf{A}$ 是 $n(=m\times l)$阶方阵，$\mathbf{I}$ 是 m 阶单位矩阵，$\mathbf{T}$ 是 m 阶方阵。矩阵 $\mathbf{A}$ 是极度稀疏的（每行至多 5 个非零元），且具有对角优势（对角元是该行或该列绝对值最大的元），而且该矩阵是对称的。矩阵 $\mathbf{A}$ 的非零元分布非常有规律，它们的数值或为 ±1，或为 4，充分地利用这些特点，可得到极为有效的算法。

例 1.1.2 考虑线性规划中的货运问题。如图 1.1.2 所示，在 0 号和 3 号站分别有 15 和 10 单位的货物，要运到 2 号站，要求所用运费最少。以 c_i 表示经第 i 条路运单位货物所需的运费（在图中用带圆圈的数字表示），x_i 表示沿给定方向经第 i 条路运输的货物的数量，则物流方程组为

$$
\mathbf{Ax}=\mathbf{B} \tag{1.1.2}
$$

其中

$$
\mathbf{A}=\begin{bmatrix}
-1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\
0 & -1 & -1 & 0 & -1 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 1
\end{bmatrix} \tag{1.1.3}
$$

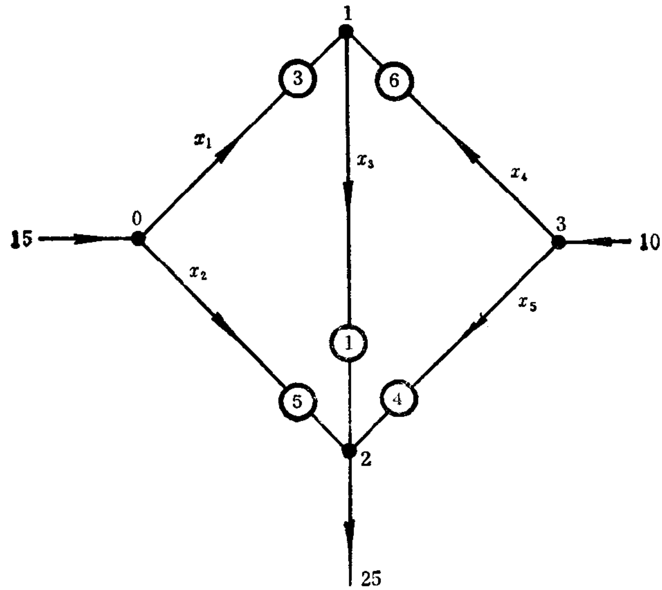

图 1.1.2 典型货运问题

$$\mathbf{B}^T=[0 \quad -25 \quad 10] \tag{1.1.4}$$

$$\mathbf{x}^T=[x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad x_4 \quad x_5] \tag{1.1.5}$$

运费为

$$\mathbf{z}=\mathbf{cx} \tag{1.1.6}$$

其中

$$\mathbf{c}=[3 \quad 5 \quad 1 \quad 6 \quad 4] \tag{1.1.7}$$

这样，问题就变为求方程组(1.1.2)的解，使得式(1.1.6)所定义的运费 **z** 最小。

这个例子中的矩阵 **A** 也是稀疏矩阵(货运站越多，**A**越稀疏)，非零元数值为 1 或 −1，但是它们的分布是不规则的，没有对称性。

这些例子说明，稀疏矩阵问题的来源是很广泛的，不仅仅是电网络问题。而且不同问题所引起的稀疏矩阵有不同特点。在这两个例子中，系数矩阵是常系数的稀疏矩阵，这是解线性规划、线

性偏微分方程、线性常微分方程组等问题的共同特点。但是在实践中更为重要的是求解非线性代数方程组、非线性常微分方程组或非线性偏微分方程组等问题，这些问题所引起的稀疏矩阵有其特点，我们将在下一节讨论。

1.2 研究稀疏线性化方程组的意义

如果我们采用牛顿-拉夫逊方法求解非线性代数方程组，或者采用多步隐式积分方法求解非线性微分方程组，或者用差分法或有限元法求解非线性偏微分方程组(经离散化后)，便可得到线性化的代数方程组。我们称这类方程组为稀疏线性化方程组。因为这些问题都需要进行迭代。所以同一个稀疏线性化方程组要求解多次，并且每次仅改变方程组的右端向量，或每次仅改变方程组的系数矩阵中非零元的数值，而稀疏结构并不发生变化。这类问题在应用中是更为重要的，对于它们采用稀疏矩阵技术具有更大的意义，因此，是本书重点讨论的问题。

现在以非线性电子电路的暂态分析为例来说明这一点，图

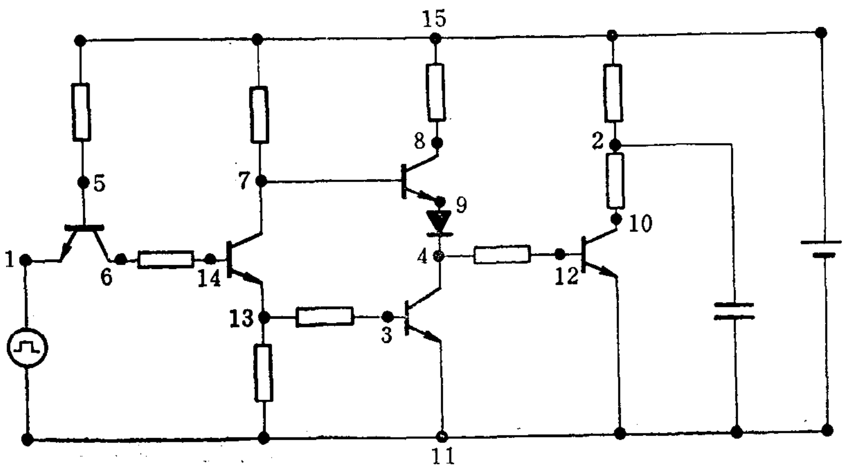

图 1.2.1 非线性电子线路

1.2.1 给出了一个简单的非线性电子电路。采用改进节点法列写电路方程，得到一个非线性代数-微分方程组：

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t)=\mathbf{0} \tag{1.2.1}$$

解方程组(1.2.1)的方法是：将时间分隔成 $t_0, t_1, t_2, \cdots, t_n, t_{n+1}, \cdots$，在 t_{n+1} 时刻有

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_{n+1}, \dot{\mathbf{x}}_{n+1}, t_{n+1})=\mathbf{0} \tag{1.2.2}$$

而 $\dot{\mathbf{x}}_{n+1} \doteq \mathbf{g}(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{n-1}, \cdots, \mathbf{x}_{n-k})$（$\mathbf{g}$ 的形式依赖于所用的积分公式，k 是积分的阶），代入式(1.2.1)得到非线性代数方程组：

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{g}(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x}_n, \cdots, \mathbf{x}_{n-k}), t_{n+1})=\mathbf{0} \tag{1.2.3}$$

利用牛顿-拉夫逊方法求解此非线性代数方程，得下列牛顿迭代方程：

$$\left.\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}_{n+1}^k}(\mathbf{x}_{n+1}^{k+1}-\mathbf{x}_{n+1}^k)=-\mathbf{f}\,\Big|_{\mathbf{x}_{n+1}^k} \tag{1.2.4}$$

或简单地写成(略去时间下标 $n+1$)：

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}^k)\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{B}(\mathbf{x}^k, t_{n+1}) \tag{1.2.5}$$

其中：$\mathbf{A}(\mathbf{x}^k)=\left.\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}_{n+1}^k}$，$\mathbf{B}(\mathbf{x}^k, t_{n+1})=-\mathbf{f}\Big|_{\mathbf{x}_{n+1}^k}+\left.\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x}\right|_{\mathbf{x}_{n+1}^k}\mathbf{x}_{n+1}^k$.

式(1.2.5)是迭代方程，当 $|\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k|<\mathrm{eps}$(预给精度)时，$\mathbf{x}^{k+1}$ 即为式(1.2.5)的解。$\mathbf{A}(\mathbf{x})$ 是雅可比矩阵，它的非零元分布如图1.2.2所示。这个矩阵不具有对角优势，因为 $a_{15,15}$ 和 $a_{16,16}$ 为零。更重要的是矩阵 $\mathbf{A}$ 的数值随迭代进程而变。其次，右端项 $\mathbf{B}$ 是时间 t 的函数，式(1.2.1)的解 x 也是 t 的函数，所以 $\mathbf{A}$ 的数值还可能随时间而变。这正是本书第八章所研究的问题。

对于非线性偏微分方程，首先用差分法或有限元法将方程在空间和时间上离散化，得到一个非线性代数方程组，于是和上述情况类似，问题归结为反复迭代求解一系列稀疏线性化方程组。

研究这类稀疏线性化方程组求解方法的直接目的是，充分

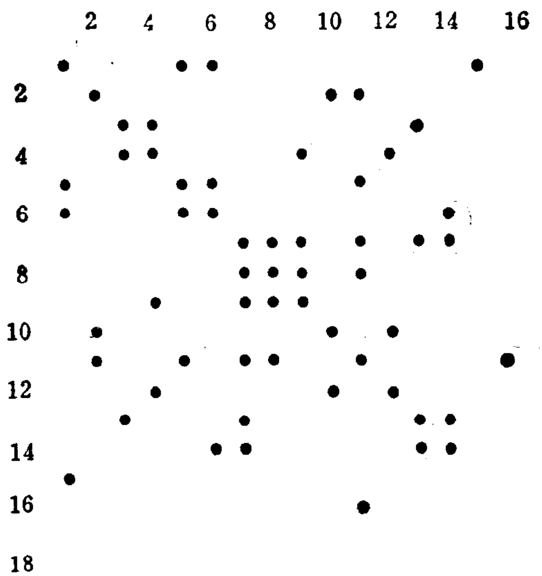

图 1.2.2　节点导纳矩阵 **A**(x)的非零元分布

利用矩阵的稀疏性来节省存贮和计算时间。很多稀疏矩阵算法都是围绕这个要求而设计的。

大家知道，用经典的高斯消去法解 n 阶的线性代数方程组，需要的计算机存贮容量与 n^2 成正比，而乘除法运算量大致与 $n^3/3$ 成正比。例如，在每秒运算二十万次的计算机上，解10阶的问题，仅需 100 个内存单元和少于 0.25 秒的机器时间；解 100 阶的问题，需要 10,000 个内存单元和 300 秒左右的机器时间，存贮单元和机器时间都比 10 阶问题有显著的增加。若用这样的机器，解 1000 阶的问题，则需 1000,000 个内存单元，而机器时间大约为 27,000,000 秒，接近 8,000 小时。存贮容量和机器时间的增加都是惊人的。然而，许多实际问题的矩阵阶数都比较高，有的几百阶，有的几千阶，有的几十万阶。显然，单靠提高计算机的运算速度和增加计算机的容量来解决这类问题是极为困难的。因为计算机的运算速度和

容量每增加一个数量级，都要求设计水平、工艺水平有一个飞跃，而上述方法对计算机容量的要求以 n^2 的速度增加，对机器速度的要求以 n^3 的速度增加，计算机工业是难于满足这类要求的。因此，研究如何节省存贮和计算时间的新算法就很有必要。

事实上，正如我们在前面所说的，在许多稀疏矩阵问题中，无论矩阵的阶数有多大，矩阵的每行、每列只有几个非零元，所以，非零元的个数与矩阵的阶数 n 成正比。如果仅存非零元、仅对非零元进行运算，那末，存贮容量与计算时间，都将与矩阵的阶数 n 成正比。因此，为了节省存贮容量和计算时间而利用和保持矩阵的稀疏性，是稀疏矩阵计算方法的重要研究课题之一。

在计算机辅助设计等领域中，有些稀疏矩阵结构复杂，不具有对角优势，并且在同一行或同一列中，非零元的绝对值的大小可能相差较大。用通常的引入比例因子的方法，解决不了这类问题。针对这类稀疏矩阵问题的算法，既要考虑如何利用稀疏性，又要设法保证求解过程的数值稳定性。

若能在求解稀疏矩阵线性化方程组的过程中，解决节省存贮容量、节省计算时间和保证求解过程的数值稳定性这些问题，就能用较小的计算机，解高阶的稀疏矩阵问题。例如，用只有 6 万个内存单元的国产 111 机，可以迅速地求解上千阶的问题[1]。高阶稀疏矩阵方程的迅速求解，又能为解决其它科学技术问题创造条件。例如，在大规模集成电路设计中，需要查找电性能方面的问题，查找方法有两种，一是用投片而后测试的方法，二是用计算机辅助电路设计系统。前者不仅耗资巨大，而且设计周期长，需要高水平的科技人员多。后者耗资少，设计周期短，需要的人力较少，但是，它需要解类似于式(1.2.1)那样的高阶稀疏矩阵线性化方程组，只有迅速地求解这类方程组，大规模集成电路的计算机辅助设计才有可能。在其它一些科学技术领域中，也有类似的情况。因

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com