

超大规模 稀疏矩阵计算方法

刘长学 编著

CHAODA
GUIMU
XISHUJUZHEN
JISUAN
FANGFA



上海科学技术出版社

本

超大规模稀疏矩阵计算方法

刘 长 学

上海科学技术出版社

超大规模稀疏矩阵计算方法

刘长学

上海科学技术出版社出版

(上海瑞金二路450号)

新华书店上海发行所发行 常熟文化印刷厂印刷

开本 787×1092 1/16 印张 22.25 字数 523,000

1991年9月第1版 1991年9月第1次印刷

印数: 1-5,000

ISBN 7-5323-2397-8/O·148

定价: 10.80元

内 容 提 要

本书是超大规模稀疏矩阵求解和求逆的一部专著,第一章到第八章介绍稀疏矩阵类型、存贮方案、基本解法、特征值计算和误差分析,着重介绍大型带状矩阵,超大规模单重与多重分块结构矩阵的多种解法和求逆等中心问题,详细讨论矩阵的结构分析、公式推导和计算方案,并精心描绘算法的基本技巧和高难度技术问题。在存贮量、运算量和数值解的精度方面,均能获得近似最佳结果。第九章介绍产生各种稀疏矩阵排序技术。最后,第十章介绍超大型最小二乘大地平差问题,本章不仅能为测绘领域提供全套大地平差技术,而且作为一个例子,介绍稀疏矩阵技术应用的全过程,可供其他行业有关技术人员应用参考。

本书可供计算数学、应用数学、计算机科学、数值分析工作者和高等院校有关专业师生,以及广大科研和工程技术人员参考。

Abstract

This book is monograph of high efficient solving and inversion of super large-scale sparse matrix. In chapters 1 to 8, sparse matrix type, storage, basic solution, eigenvalue calculations and errors analysis are described. The central problem of several solution and inversion are also stress described for large band matrix and super large-scale sparse Single and multiple partitioned struture matrix. Matrix struture analysis, formula deduce and computation schemes are also detailed discussed, and the basic techniques of algorithm and technology problems of degree of high difficulty are also meticulously described. Therefore, an approximate best result is obtained in the total storage and much work and accuracy of numerical solution. In chapter 9, ordering technology of produce several sparse matrices are discussed. Last, in chapter 10, the geodetic adjustment problem of super large-scale sparse least-squares are discussed, this chapter not only provide all the geodetic adjustment technology of survey and drawing field, and as a example, the all processes of sparse matrix technology appled are described, its may provide science and technology worker application reference in the other field.

This book may provide computational mathematicians, applied mathematicians, computer scientists, numerical analysts and relevant, speciality students and teachers of university, and scientific research personnel and engineering technology personnel reference.

序 言

随着计算机功能和速度的增长,大规模矩阵计算得到了很大的发展。60年代国际上产生了5000阶、10000阶或更高阶的矩阵计算问题,70年代在测绘领域中提出了 400000×200000 的超定方程和 2500000×400000 的超定方程,到了80年代又提出了具有 6000000×400000 的超定方程,其系数矩阵具有 2.4×10^{12} 个元素。在特征值计算中,矩阵规模同样有类似的增长趋势,其中大的矩阵有2000、4900和12000阶,可以断言随着科学技术的发展,矩阵的阶将还会不断增加,然而这仅是问题的一个方面。另一方面,矩阵规模的增大,存贮量和工作量都有所增加,矩阵问题的计算代价将迅速增长。虽然计算技术有较快的发展,但还是跟不上实际的需要。因此,对于在小型计算机上或微型计算机上出现的大型或超大型存贮量、运算工作量和计算解精度等问题,已成为计算数学工作者和工程技术人员的重要研究课题,也是本书的主要内容。

稀疏矩阵技术这门科学,是理论发展、数值经验和实际考虑的有机结合。它不仅在广大应用领域中是一种重要的计算工具,而且它的本身对计算机软件发展也是一个有价值的贡献。在近二十年的发展时间内,对各类矩阵问题设计出许多近似优化算法,在许多领域中应用得很活跃,且应用范围将继续不断地扩大,稀疏矩阵计算技术也将会不断地完善和发展。

本书材料主要取自作者70年代以来的稀疏矩阵方面的若干篇论文,以及“稀疏矩阵和直接解法”讲稿资料,并吸收了国际上的一些新近成果。

全书共分十章。第一章介绍稀疏矩阵概念、基本类型、应用范围和稀疏矩阵各种存贮技术;第二章介绍稀疏矩阵方程各种有效解法、求逆方法和提高精度方法;第三章介绍稀疏矩阵特征问题的计算方法;第四章介绍稀疏矩阵计算过程中的误差分析;第五章介绍大型带状矩阵方程和大型阶梯矩阵方程的有效算法;第六章介绍稀疏单重子结构矩阵方程算法;第七章介绍超大型稀疏二重子结构矩阵方程算法;第八章讨论稀疏矩阵的求逆算法;第九章以图论为基础,详细讨论对称与非对称稀疏矩阵排序算法和介绍产生稀疏矩阵有利结构的各种方法;第十章结合大地测量平差计算实例,介绍超大型稀疏最小二乘平差问题的几种解法。

本书对研究稀疏矩阵结构,高效率的算法和高质量应用软件,均有良好的帮助和参考价值。书中算法是经过精心描绘,详细讨论和上机测试,实用性较强。

本书的初稿是1980年1月到1982年3月在上海计算所完成的,1989年1月到1990年3月在江苏省盐城市微机应用研究所对原稿的有关章节作了较大的增删和文字修改,并最后定稿。在本书的写作过程中,曾得到盐城市科学技术委员会、盐城市微机应用研究所领导和同志们的关心和支持,在此表示衷心的感谢。

书中错误之处在所难免,敬请读者批评指正。

刘长学

1990年3月于盐城

目 录

序言

第一章 稀疏矩阵、基本类型和存贮方式	1
§ 1.1 稀疏矩阵及其应用领域	1
§ 1.2 稀疏矩阵基本类型	2
§ 1.3 覆盖存贮法	8
§ 1.4 拼凑存贮法	8
§ 1.5 数组、列表、堆栈和排队存贮法	9
§ 1.6 整数表存贮法	10
§ 1.7 图的表示和存贮	12
§ 1.8 等带宽存贮法	14
§ 1.9 变带宽存贮法	15
§ 1.10 大型变带状矩阵分段内外存结合存贮方案	16
§ 1.11 大型阶梯矩阵分档内外存结合存贮方案	18
§ 1.12 连接稀疏矩阵存贮方案	20
§ 1.13 稀疏矩阵行格式存贮方法	22
§ 1.14 稀疏矩阵有序和无序表示	23
§ 1.15 Sherman's 压缩存贮方案	25
§ 1.16 矩阵分块存贮方案	26
§ 1.17 符号处理和动态存贮方案	27
§ 1.18 合并整型稀疏表及多重开关技术	28
§ 1.19 利用扩展实累加器作稀疏向量加法	29
§ 1.20 借助扩展指标整型数组,作稀疏向量加法	31
§ 1.21 借助指标数组作两个稀疏向量乘积	31
第二章 稀疏矩阵基本解法	33
§ 2.1 某些定义和性质	33
§ 2.2 列高斯消去法	38
§ 2.3 行高斯消去法	40
§ 2.4 高斯-若当消去法	41
§ 2.5 Crout 和 Doolittle 三角因子分解	44
§ 2.6 对称正定矩阵的 Cholesky 因子分解	49
§ 2.7 修改主元的三角因子分解法	57
§ 2.8 Householder 及其改进算法	63
§ 2.9 Givens 及其改进算法	66

§ 2.10 数值解的精度改善	73
第三章 稀疏矩阵特征值问题	78
§ 3.1 引言	78
§ 3.2 Rayleigh 商迭代法	79
§ 3.3 特征值的界	80
§ 3.4 计算特征值的二分法	81
§ 3.5 一般矩阵的简化	82
§ 3.6 用 Givens 方法简化对称带状矩阵为三对角形式	83
§ 3.7 三对角和 Hessenberg 矩阵的特征分析	85
§ 3.8 直接迭代法和逆迭代法	85
§ 3.9 子空间和不变子空间	87
§ 3.10 同步迭代法	89
§ 3.11 Lanczos 算法	91
§ 3.12 Lanczos 算法的实际考虑	94
§ 3.13 块 Lanczos 和带 Lanczos 算法	95
§ 3.14 轨迹极小化	96
§ 3.15 埃尔米特矩阵的特征分析	97
§ 3.16 不对称特征问题	97
第四章 稀疏矩阵计算中的误差分析	99
§ 4.1 非零元素分布表示、矩阵分解的运算量和存贮量	99
§ 4.2 稀疏矩阵三角因子分解的误差分析	101
§ 4.3 稀疏三角形矩阵方程的求解误差分析	105
§ 4.4 稀疏矩阵消去法的误差分析	110
§ 4.5 稀疏矩阵计算的数值误差控制	112
第五章 大型稀疏矩阵的逐行、逐列和分块解法	117
第一部分 大型带状矩阵的逐行分解法	117
§ 5.1 存贮方案	117
§ 5.2 一维公式	117
§ 5.3 平移定理	118
§ 5.4 带状矩阵结构分析	119
§ 5.5 数值解的迭代改善	121
§ 5.6 运算次数和内外存交换次数的估计	121
§ 5.7 算法思想的描述	122
§ 5.8 算法程序实现方案	124
§ 5.9 程序功能、算例和程序	126
第二部分 大型阶梯矩阵的逐列分解法	135
§ 5.10 快速计算公式	135
§ 5.11 矩阵结构分析	136
§ 5.12 算法思想的描述	137

§ 5.13	运算次数及内外存交换次数的估计	138
§ 5.14	算法程序实现方案	139
§ 5.15	程序功能、算例和程序	140
第三部分	大型阶梯矩阵的分块分解新算法	144
§ 5.16	存贮方式	144
§ 5.17	快速计算公式和运算次数的估计	145
§ 5.18	算法思想的描述	149
§ 5.19	算法程序实现方案	149
第四部分	大型稀疏矩阵的三角因子分解法	150
§ 5.20	存贮方式	151
§ 5.21	三角因子分解公式	151
§ 5.22	算法思想的描述及其程序实现方案	153
§ 5.23	程序功能、算例和程序	157
第六章	超大型稀疏单重分区结构矩阵分块解法	163
第一部分	稀疏单重分区结构矩阵的分块分解法	163
§ 6.1	单重分区结构矩阵方程及其分块分解法	163
§ 6.2	单重分区结构矩阵分析	165
§ 6.3	存贮方案	170
§ 6.4	算法思想的描述	170
§ 6.5	算法程序实现方案	174
第二部分	稀疏单重分区结构矩阵的直接分解法	177
§ 6.6	单重分区结构矩阵方程和直接分解计算公式	177
§ 6.7	单重分区结构矩阵分析	182
§ 6.8	存贮方式	182
§ 6.9	算法思想的描述	183
§ 6.10	算法程序实现方案	186
第七章	超大规模稀疏多重分区结构矩阵分块解法	188
第一部分	超大规模稀疏二重分区结构矩阵分块解法	188
§ 7.1	二重分区结构矩阵问题	188
§ 7.2	计算公式推导	192
§ 7.3	二重分区结构矩阵分析	204
§ 7.4	存贮方案	207
§ 7.5	计算方案	208
§ 7.6	算法程序实现方案	211
§ 7.7	运算工作量的估计与某些简单的比较	213
第二部分	超大规模稀疏反向三重分区结构矩阵分块解法	215
§ 7.8	问题的提法	215
§ 7.9	计算公式	216
§ 7.10	计算方案	218

第八章 超大规模稀疏矩阵的逆阵计算	221
§ 8.1 带状矩阵的求逆算法	221
§ 8.2 大型三对角块矩阵求逆算法	224
§ 8.3 超大型单重分区结构矩阵求逆算法	228
§ 8.4 超大规模稀疏二重分区结构矩阵的部分逆阵元素算法	234
§ 8.5 反向单重分区结构矩阵的逆阵算法	245
§ 8.6 反向二重分区结构矩阵的逆阵算法	247
第九章 稀疏矩阵排序技术	251
第一部分 对称矩阵高斯消去法排序	251
§ 9.1 引言	251
§ 9.2 图论基本概念	252
§ 9.3 宽度优先搜索法和相邻等级结构	255
§ 9.4 找出图中的伪边周顶点和狭窄等级结构	256
§ 9.5 减少对称矩阵带宽	257
§ 9.6 减少对称矩阵的轮廓	258
§ 9.7 对称高斯消去法的图论背景	259
§ 9.8 最小度算法	261
§ 9.9 一个对称稀疏矩阵的树分割	263
§ 9.10 嵌套剖分	266
§ 9.11 有限元问题的一维剖分和矩阵元素装配	269
§ 9.12 大地平差问题的一维剖分和矩阵元素装配	272
§ 9.13 大地平差问题的二维剖分法	277
§ 9.14 无向图的深度优先搜索法	279
第二部分 不对称矩阵高斯消去法排序	282
§ 9.15 关于不对称矩阵的图论	282
§ 9.16 图的强构件	283
§ 9.17 有向图的深度优先搜索法	284
§ 9.18 有向图的宽度优先搜索法和有向图相邻等级结构	287
§ 9.19 在非周期有向图中找出不相交路径顶点的最大集合	288
§ 9.20 找出横截的 Hall 算法	289
§ 9.21 找出横截的 Hopcroft 和 Karp 算法	290
第十章 超大规模稀疏最小二乘大地平差问题	295
§ 10.1 误差方程式和法化方程式的组成原理	295
§ 10.2 块正交化法	299
§ 10.3 块 Cholesky 分解法	305
§ 10.4 五万点平差算例	316
§ 10.5 结论	324
§ 10.6 附录	325
参考文献	341

稀疏矩阵、基本类型和存贮方式

§ 1.1 稀疏矩阵及其应用领域

矩阵是数字有规律的排列，稀疏矩阵通常的概念是，当某一矩阵有许多元素等于零时，则称其为稀疏的。也有用极限概念来描述的， n 阶矩阵是稀疏的，当它有 $o(n)$ 非零元素。即对充分大的 n ，非零元素与 n 成比例。这一定义在理论上是有效的，例如试图估价算法的渐近行为，对于 n 阶稀疏矩阵，非零元素的数字必须是 $n^{1+\gamma}$ ，其中 $\gamma < 1$ 。对于电学问题， γ 的标准值为 0.2，对于和网络相联的带状矩阵， γ 的标准值为 0.5。1000 阶矩阵 $\gamma = 0.9$ 时，有 501187 个非零元素。

一个稀疏矩阵，其数字可以不规则排列，但和它们相联系的编号位置是规则的，因此，依次规则排列可以作为研制算法的参考依据。考虑下列 8 阶稀疏矩阵：

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cccccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\
 \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \end{array} & \begin{bmatrix}
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\
 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 1
 \end{bmatrix}
 \end{array}
 \end{array}$$

这个矩阵仅有 16 个元素，但占了 64 个单元。考虑到这些零元素充满那些和非零元素不相干的位置，是完全不必要的，我们应当充分利用那么许多零元素的存在。严格地讲，稀疏矩阵不应当完全看作矩阵，更确切地讲稀疏矩阵应看为一个图：每个方程与未知数是和网络顶点相联系的，并且每个系数和某一条边相联系，这就是为什么图论在稀疏矩阵技术中扮演一个重要角色的原因，它也是稀疏矩阵技术自身的起源。稀疏矩阵是无规则的数字集合，不能象稠密矩阵那样用简单途径，把它们表示在计算机的存贮器中。如果要存贮方程组的系数数值，还必须要存贮和方程的系数相应的行与列的数值。用稀疏矩阵的行话来说，存放非零元素值，还要存贮索引信息，告诉每一个非零元素在排列规则中的位址，这些附加信息构成总的开销，是避免存贮零元素所付出的代价。

稀疏矩阵算法设计途径是处理被存贮的非零元素，并且可以利用前面知道的非零元素的位址，用来避免那些和零有关的加法或乘法运算。在计算机算法执行期间，所完成的运算次数与非零元素总数成比例，而不是和整个矩阵元素总数成比例。注意到它没有精确存贮包含零元素的全部元素，于是用一个 IF 语句方式，能够跳过包含零元素的运算，在 n 阶矩阵中构造二次方的算法，IF 语句不需要执行 n^2 次或更多次。当稀疏矩阵每行非零元素的

个数为常数时,一个好的算法的阶数,在一般情况下和 n 的阶一样低。

描述稀疏矩阵所给出的信息,即可靠地给出矩阵的稀疏性。我们问是否存在一种算法,使用该算法作用在此稀疏矩阵上,能够产生较少的非零元素,用来改善矩阵的稀疏性。在一般情况下回答是肯定的,如高斯消去法和乔勒斯基分解及其改进方案等,均对稀疏矩阵是有效的方法。但是高斯消去法引进了新的非零元素,削弱了原始矩阵的稀疏性,所产生的矩阵较原始矩阵有较少的稀疏性,但填充幅度取决于主元选取的次序。一个好的稀疏矩阵算法,应该保持稀疏性,保持填充量极小化。

众所周知,稀疏矩阵技术应用极为广泛,需要列出它的全部应用领域是一件困难的事,我们把它分为几大类,每类再分成一些具体的应用领域,其中某些应用领域对稀疏矩阵研究的影响和稀疏矩阵的研究对这些领域的本身的影响一样深远: ① 数值分析——特征值计算、积分方程、线性和非线性方程、线性规划、常微分方程、偏微分方程; ② 数学——组合学、计算理论、动态规划、模型建立、运筹学与统计; ③ 工程技术——网络的补偿法、计算机辅助网络设计、电子和电气网络、电力网、频域分析、水力网、结构分析; ④ 应用科学——化学工程、数据处理、遗传学、摄影测绘学、大地测量学、水库模拟、勘测、水的运输现象; ⑤ 理论科学——化学、反应动力学、结晶学、物理; ⑥ 人文科学——汽车的发展、商业管理、经济学、学校的排课、社会科学、城市规划。

§ 1.2 稀疏矩阵基本类型

在本节中就其经常出现的稀疏矩阵基本类型给出如下:

1. 上三角阵、下三角阵、对角阵和单位阵

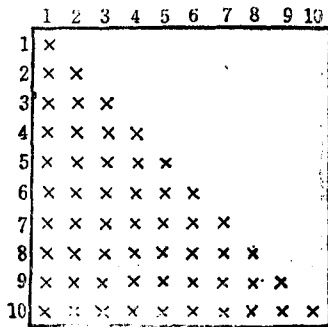


图 1.1 下三角阵

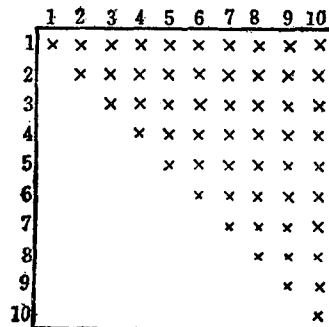


图 1.2 上三角阵

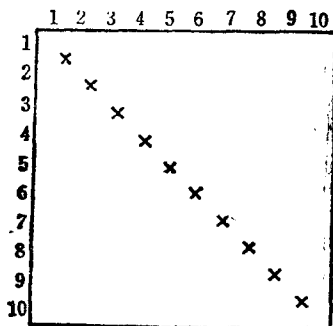


图 1.3 对角阵

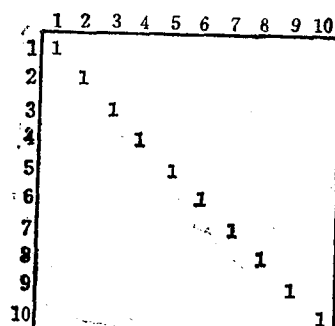


图 1.4 单位阵

2. 对称等带状矩阵和非对称等带状矩阵

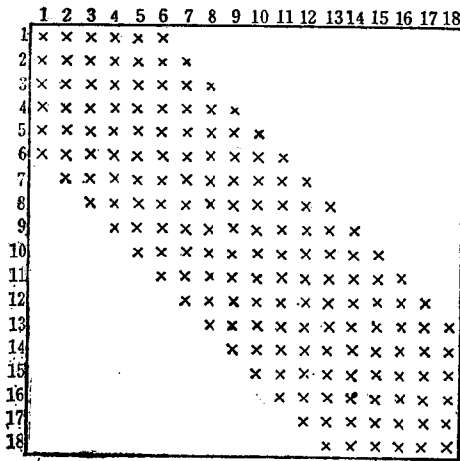


图 1.5 对称等带状矩阵

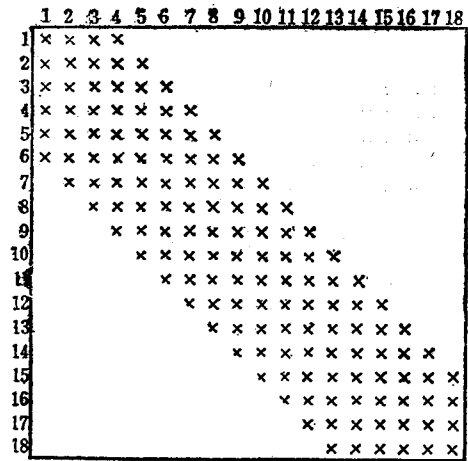


图 1.6 非对称等带状矩阵

3. 对称等带状循环矩阵和非对称等带状循环矩阵

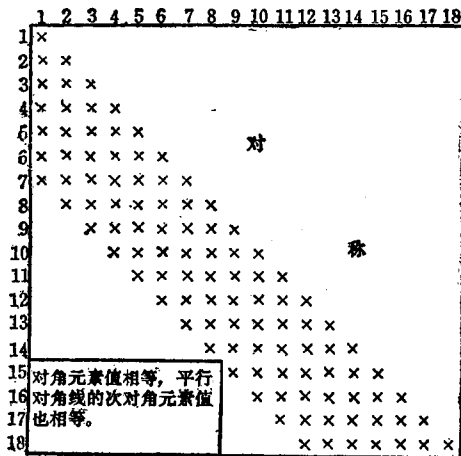


图 1.7 对称等带状循环矩阵

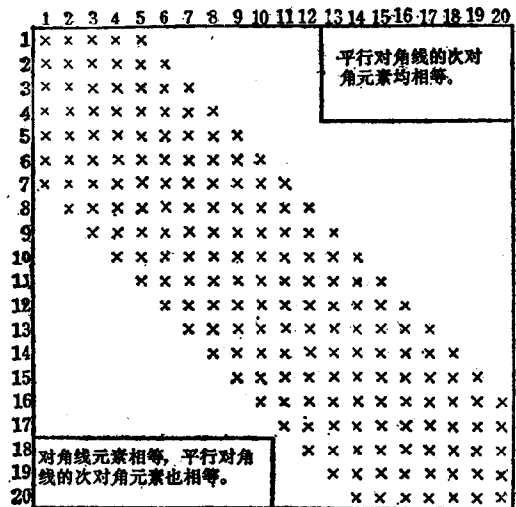


图 1.8 非对称等带状循环矩阵

4. 对称变带状矩阵和非对称变带状矩阵

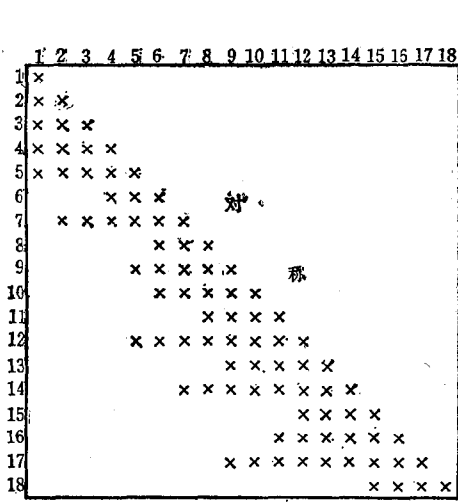


图 1.9 对称变带状矩阵

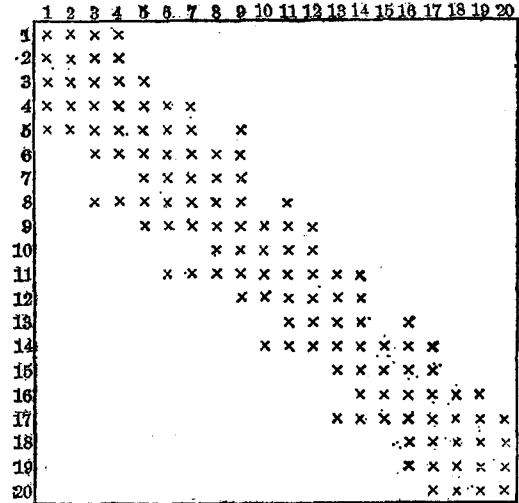


图 1.10 非对称变带状矩阵

5. 对称阶梯矩阵和非对称阶梯矩阵

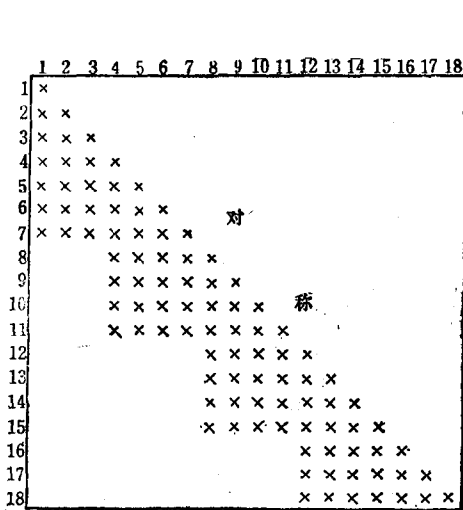


图 1.11 对称阶梯矩阵

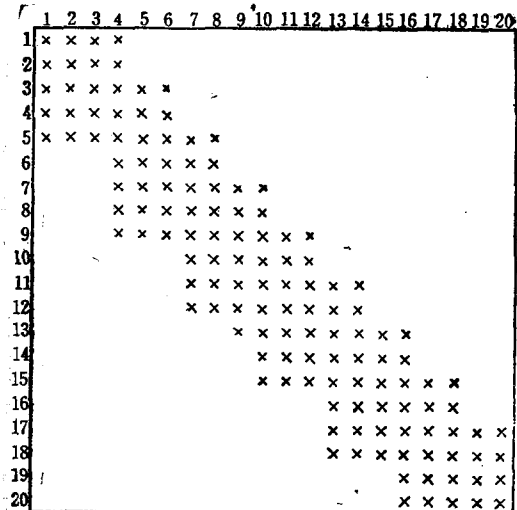


图 1.12 非对称阶梯矩阵

6. 对称稀疏矩阵和非对称稀疏矩阵

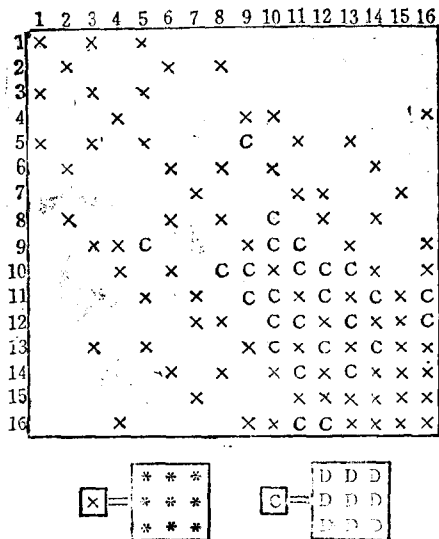


图 1.13 对称稀疏矩阵

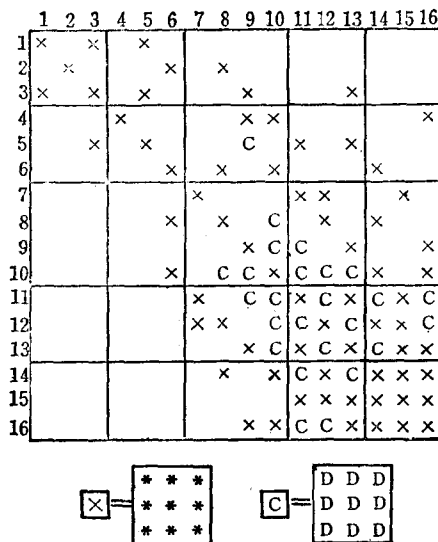


图 1.14 非对称稀疏矩阵

7. 稀疏对称单重子结构矩阵

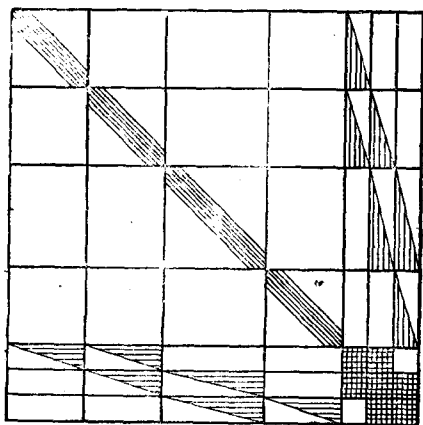


图 1.15 稀疏对称单重子结构矩阵(一)

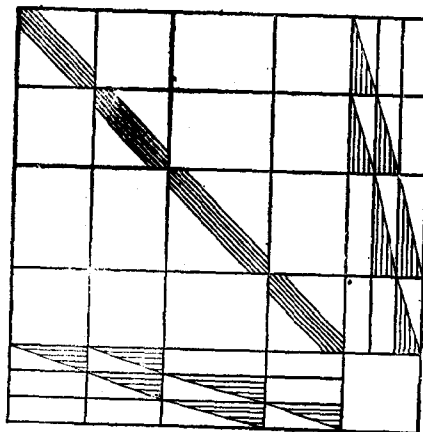


图 1.16 稀疏对称单重子结构矩阵(二)

8. 稀疏对称二重子结构矩阵和稀疏对称增广矩阵

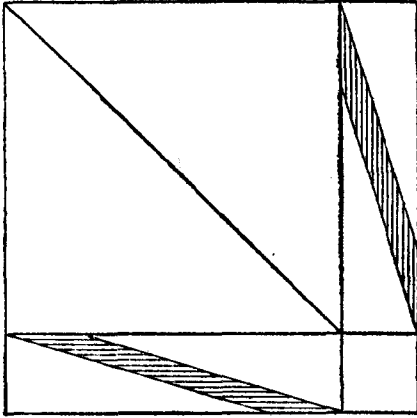


图 1.17 稀疏对称增广矩阵

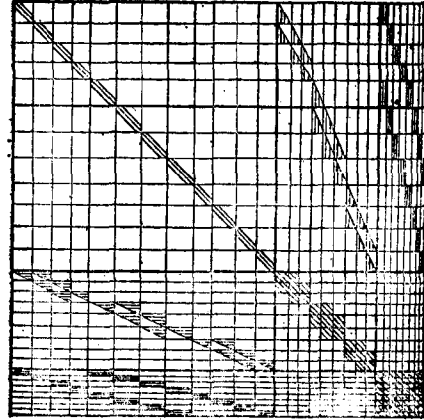


图 1.18 稀疏对称二重子结构矩阵

9. 稀疏对称反向单重和二重子结构矩阵

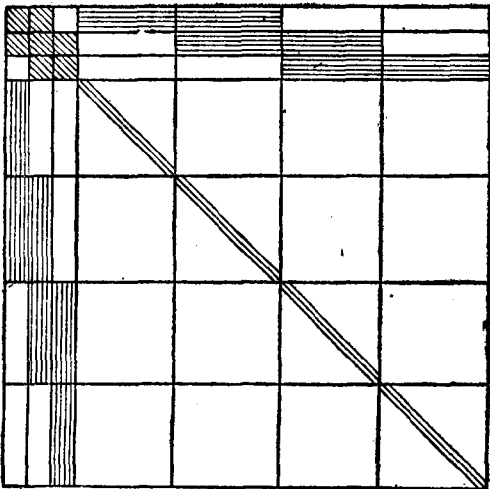


图 1.19 稀疏对称反向单重子结构矩阵

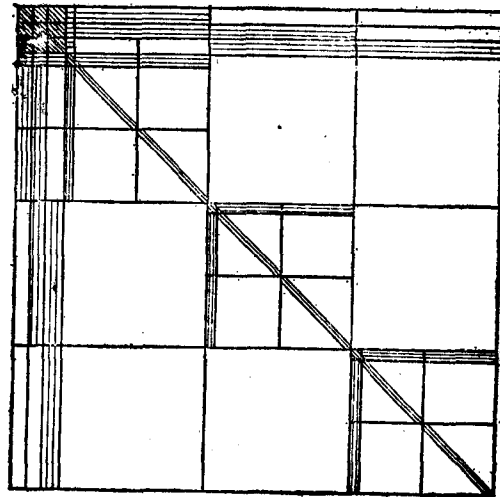


图 1.20 稀疏对称反向二重子结构矩阵

10. 稀疏长方带状矩阵

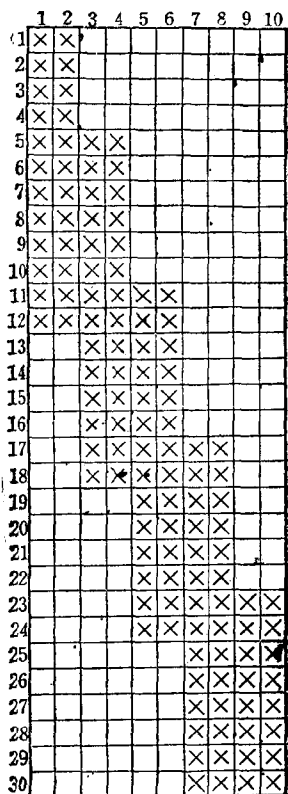


图 1.21 长方带状矩阵

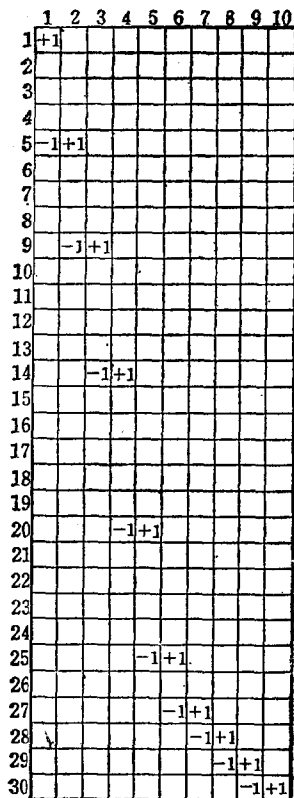


图 1.22 极稀疏长方带状矩阵

11. 三对角线矩阵和上海森堡矩阵

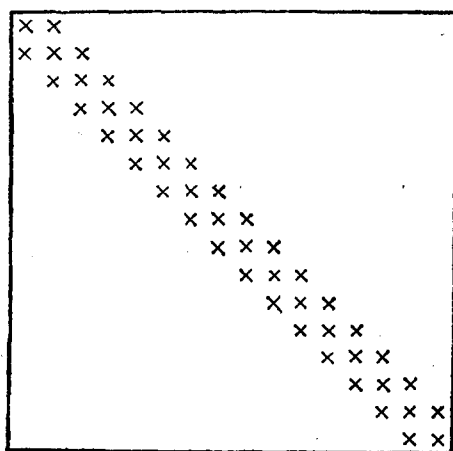


图 1.23 三对角线矩阵

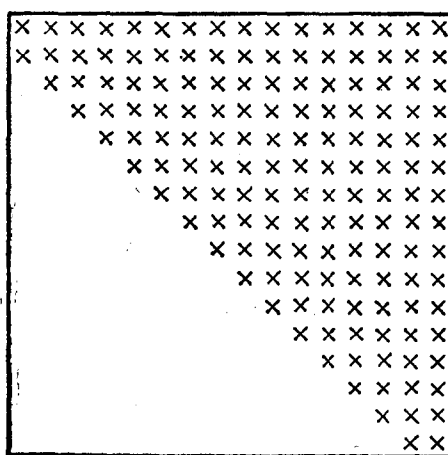


图 1.24 上海森堡矩阵