

大型稀疏线性方程组的解法

刘万勋 刘长学 编
华伯浩 郑家栋

国防工业出版社

大型稀疏线性方程组的解法

刘万勋 刘长学 编
华伯浩 郑家栋

国防工业出版社

内 容 简 介

本书比较系统地叙述了在电子计算机上求解大型稀疏线性方程组的各种方法及其程序技巧,对于变带宽算法、稀疏高斯消去法、波阵法、子结构法、存储量优化、最小二乘问题的正交化算法等都作了较详细的讨论,内容部分地反映了这一领域的新近成果。最后还给出了几个算法程序,供读者参考。

本书对象是计算数学工作者、从事实际计算的工程技术人员、大学生和研究生。

大型稀疏线性方程组的解法

刘万勋·刘长学 编
华伯浩 郑家栋

国防工业出版社出版

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售
上海商务印刷厂承排 国防工业出版社印刷厂印装

787×1092 1/16 印张12 1/4 284千字

1981年1月第一版 1981年1月第一次印刷 印数: 0,001— 2,800册

统一书号: 15034·2024 定价: 1.30元

前 言

稀疏线性方程组的解法是数值线性代数的一个新方向,在微分方程数值解、数学规划、网络分析、有限元分析等领域有着重要的应用。近年来,稀疏矩阵技术得到了较大的发展,我国的计算数学工作者和工程技术人员正在开展这方面的工作。为了满足国内的需要,我们尝试整理稀疏矩阵的文献,结合自己的工作经验,编成这本比较系统地叙述在电子计算机上求解大型稀疏线性方程组的书籍。书中除了介绍有关的计算方法外,重点放在阐明如何应用稀疏矩阵技术,使这些方法在计算机上有效地实现的问题,内容部分地反映了新近成果。为了读者能够容易地阅读本书,对于一些不常见的线性代数定理也给出了证明。稀疏算法的误差分析无疑是重要的,但不久这方面的内容将有专著论述,在此,我们就不加讨论。

全书共六章,内容概要介绍如下:

第一章叙述稀疏矩阵的定义,引入一些基本概念,然后描述了稀疏矩阵的几个常用的存储方法。

第二章以高斯消去法为主,介绍了各种直接解法,阐明了将这些方法应用于稀疏矩阵时的一些性质,作为下一章的基础。

第三章是本书的重点,对于变带宽算法,稀疏高斯消去法和波阵法的原理及其程序实现问题作了详细讨论。此外,还介绍了子结构法和分裂技术,对局部填充极小化和带宽极小化也提供了一些有效的算法。

第四章叙述了求解最小二乘问题的正交化方法,讨论了解法的理论基础和应用带形矩阵的分块序列处理技术。最后,介绍了一个迭代法——双对角化方法。

第五章简要介绍稀疏线性方程组的一些迭代解法,包括逐次超松弛法、共轭斜量法和兰佐斯方法,后者可用于解对称非定方程组。

第六章中给出了几个程序,以便帮助读者进一步了解一些算法的技术细节。

书末列出了有关文献,有几节内容也曾参考过吉林大学、上海科技大学、华东化工学院的一些油印资料。

本书由上海计算技术研究所第一研究室组织刘万勋、刘长学、华伯浩、郑家栋(笔划序)四人执笔写成,最后由郑家栋对全书作了统一修改、增删和调整,顾鼎铭也参加了部分修改工作。

复旦大学计算方法教研组曹志浩同志审阅了本书原稿。在编写过程中,还得到我所一些同志的热心帮助,对此,我们表示衷心感谢。

由于我们水平有限,书中一定还存在不少缺点和错误;本书的算法程序,虽曾解算过一些课题,但在进一步使用中,也可能出现一些问题,我们恳切希望读者给予批评指正。

编 者

目 录

第一章 绪论	1
§ 1.1 稀疏矩阵的定义、实例	1
§ 1.2 图和稀疏矩阵	6
§ 1.3 稀疏线性方程组解法的基本类型	8
§ 1.4 稀疏矩阵的压缩存储方法	8
§ 1.4.1 等带宽存储法	9
§ 1.4.2 变带宽存储法	9
§ 1.4.3 索引存储法	10
§ 1.4.4 连接表存储法	11
§ 1.4.5 超矩阵存储法	13
第二章 高斯消去法及其变形	15
§ 2.1 引言	15
§ 2.2 高斯消去法	16
§ 2.2.1 基本方法	16
§ 2.2.2 主元选择	18
§ 2.2.3 高斯消去法的一些性质	19
§ 2.2.4 行高斯消去法	20
§ 2.2.5 对称高斯消去法	21
§ 2.3 高斯-约当消去法	23
§ 2.4 直接三角形分解法	24
§ 2.4.1 克劳特分解法	24
§ 2.4.2 正定对称矩阵的乔利斯基方法	25
§ 2.5 块高斯消去法及其三角因子分解表示	26
§ 2.6 矩阵的秩 1 修正和修改主元素法	27
§ 2.6.1 矩阵的秩 1 修正	27
§ 2.6.2 修改主元素法	29
§ 2.7 方程组解的迭代改进	29
第三章 稀疏矩阵技术	31
§ 3.1 带形方程组的变带宽算法	31
§ 3.1.1 带形方程组的高斯法	31
§ 3.1.2 对称正定带形方程组的列变带宽算法	34
§ 3.1.3 对称正定带形方程组的行变带宽算法	39
§ 3.1.4 非对称带形方程组的变带宽算法	42
§ 3.2 稀疏高斯消去法	43
§ 3.2.1 符号分解	44
§ 3.2.2 非对称方程组的稀疏高斯消去法	45
§ 3.2.3 对称正定方程组的稀疏高斯消去法	46
§ 3.2.4 对高阶稀疏矩阵的应用	52

§ 3.3 波阵法	52
§ 3.3.1 波阵法的消元过程	52
§ 3.3.2 非对称线性方程组的波阵解法	54
§ 3.3.3 对称正定矩阵的波阵技术	57
§ 3.4 子结构法	60
§ 3.4.1 子结构法的基本原理	61
§ 3.4.2 大型复杂结构的子结构分析	63
§ 3.4.3 子结构技术的发展	66
§ 3.4.4 一个特殊稀疏结构的线性方程组的解	70
§ 3.5 分裂和修改技术	72
§ 3.5.1 分块和修改	73
§ 3.5.2 伍德伯里-谢尔曼-莫里森公式	74
§ 3.5.3 修改矩阵的三角形分解	75
§ 3.5.4 秩 1 修改矩阵的 LDL^T 分解	78
§ 3.6 局部填充极小化	80
§ 3.6.1 基本定理	80
§ 3.6.2 高斯消去法的图论解释	82
§ 3.6.3 近似最佳编序方法	84
§ 3.7 带宽极小化方法	87
§ 3.7.1 引言	87
§ 3.7.2 卡雪尔-麦基算法	88
§ 3.7.3 吉布斯-普尔-斯托克迈耶算法	94
§ 3.7.4 罗森算法	98
§ 3.7.5 阿基茨-厄特库算法	99
§ 3.7.6 艾克拉斯-德哈特算法	100
§ 3.7.7 格鲁姆斯算法	101
§ 3.7.8 小结	102
第四章 正交变换与最小二乘解	103
§ 4.1 预备定理	103
§ 4.2 豪斯霍尔德-吉文斯方法	106
§ 4.2.1 豪斯霍尔德正交变换	106
§ 4.2.2 用 H 变换解最小二乘问题	107
§ 4.2.3 分块顺序处理法	109
§ 4.2.4 带形阵的分块顺序处理技术	111
§ 4.2.5 吉文斯变换及其改进算法	113
§ 4.2.6 $A^T A$ 的乔利斯基分解	117
§ 4.3 改进格拉姆-施米特正交化方法	117
§ 4.4 双对角化方法	119
§ 4.4.1 双对角化算法	119
§ 4.4.2 用双对角化方法求最小二乘解	121
第五章 迭代法	124
§ 5.1 SOR 法与 SSOR 法	124
§ 5.1.1 基本迭代法	125
§ 5.1.2 松弛因子的选择	127
§ 5.1.3 加速技术	127

§ 5.1.4 对称超松弛法	129
§ 5.2 共轭斜量法	132
§ 5.3 兰佐斯方法	134
§ 5.3.1 兰佐斯向量	135
§ 5.3.2 一般讨论	137
§ 5.3.3 解对称非定方程组的一个算法	139
§ 5.3.4 最小余量法	142
第六章 常用算法程序	144
§ 6.1 高阶稀疏对称正定线性方程组变带宽解法程序(I)	144
§ 6.2 高阶稀疏对称正定线性方程组变带宽解法程序(II)	147
§ 6.3 非对称稀疏线性方程组的波阵解程序	156
§ 6.4 索引存贮稀疏高斯消去法程序	160
§ 6.5 修改主元的高斯消去法程序	166
§ 6.6 病态方程组的迭代校正法程序	168
§ 6.7 用豪斯霍尔德变换求最小二乘解程序(带阵或满阵)	171
§ 6.8 共轭斜量法程序	178
§ 6.9 结点近似最佳编序算法程序	180
§ 6.10 RCM 算法程序	182
参考文献	185

第一章 绪 论

§ 1.1 稀疏矩阵的定义、实例

数值线性代数的基本问题之一是求解线性代数方程组。随着计算技术的发展,线性代数方程组的解法也在不断更新。近十几年来,从微分方程数值解、线性规划、网络分析、结构和非结构问题的有限元分析等领域提出了求解高阶稀疏线性方程组的问题,方程组的阶数可由上千阶直至几十万阶,如果用普通的方法和技术求解,困难很大。首先是存贮问题,例如解一个一千阶的方程组,仅存贮系数矩阵,就需要一百万个存贮单元;其次是计算时间太长,往往因超出了机器的稳定时间而失败。为了解决这些矛盾,必须研究稀疏线性方程组的有效解法。

稀疏线性方程组的系数矩阵是一个稀疏矩阵,矩阵的绝大多数或大多数的元素是零。一般说来,一个 $n \times n$ 矩阵,倘若其非零元总数 $\lambda \approx O(n)$,就可称之为稀疏矩阵^[50]。我们定义 $\rho = \lambda/n^2$ 为稀疏矩阵的密度。一百阶左右的稀疏矩阵,密度可在 15~25% 之间,而阶数愈高,密度愈低^[42]。由不同的实际问题所得到的稀疏矩阵,其密度也是不同的。例如,大型结构分析中产生的稀疏矩阵,密度可低于 5%,而在电力系统中,结点数为一百时产生的稀疏矩阵密度仅为 4%,当结点数增至五百时,密度可降至 1%。在有的实际问题中遇到的稀疏矩阵,每行非零元可以只有 2~10 个。从这些情况看来,在解稀疏线性方程组时,如何利用系数矩阵的稀疏性来避免零元素的存贮和运算,是一个必须考虑的问题。

我们知道,解一个系数矩阵为满的 n 阶的线性方程组要求 $O(n^2)$ 个存贮单元和 $O(n^3)$ 次乘法、加法运算。当系数矩阵是稀疏矩阵时,可以利用稀疏性,降低存贮量和运算次数。由于 $\lambda \approx O(n)$,我们希望将存贮量和运算量相应地降至 $O(n)$ 。最近十多年来的研究,已经比较满意地解决了这个问题,一些古典方法,诸如高斯消去法,经过考验和改造之后,已经成为求解高阶稀疏线性方程组最常用的方法之一;与此同时,形成了一门颇受重视和发展迅速的专门技术——稀疏矩阵技术。此外,有些曾被一度忽视的迭代法,如共轭斜量法、兰佐斯(Lanczos)方法等,也被重新研究,得到了很大的发展。时至今日,在每秒一百万次的电子计算机上求解几万阶的稀疏线性方程组已经不是十分困难的事情了。

稀疏矩阵中零元素和非零元素的分布状态称为矩阵的稀疏结构。稀疏矩阵可按其稀疏结构来分类。图 1.1.1 所示的稀疏矩阵的非零元素集中在主对角线附近,即存在 $s, t > 0$, 当 $i-j \geq s$ 或 $j-i \geq t$ 时必有 $a_{ij} = 0$, 这种矩阵称为带形矩阵。有些稀疏矩阵的非零元素分布是不规则的,如图 1.1.2 所示,我们称这种矩阵为具有随机分布的稀疏结构。这两种稀疏矩阵在电网络分析、结构分析、微分方程数值解等问题中是经常遇到的。由于它们的稀疏结构完全不同,其存贮技术和求解程序也完全不同,因此必须分别进行研究。对于这两类稀疏矩阵,若矩阵 A 的非零元素满足 $a_{ij} \neq 0$ 当且仅当 $a_{ji} \neq 0$, 则称 A 为具有对称分布的稀疏结构。对称矩阵一定具有对称分布的稀疏结构,反之未必为真。

现在举一些例子,说明许多实际问题最终可以归结为求解稀疏线性方程组。

(1) 考虑矩形区域 Ω 上的泊松方程的第一边值问题

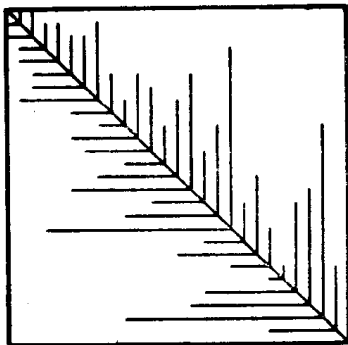


图 1.1.1

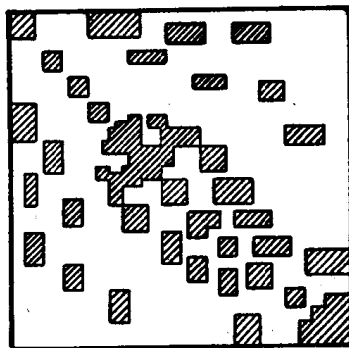


图 1.1.2

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) \quad u|_{\Gamma} = \varphi(x, y) \quad (1.1.1)$$

这里 Γ 是 Ω 的边界。

在 Ω 上作矩形网格, x 方向步长为 h , 分为 m 等分; y 方向步长为 l , 分成 n 等分 (图 1.1.3)。用差商代替偏导数, 即令

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,k} \approx \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h^2}$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i,k} \approx \frac{u_{i,k+1} - 2u_{i,k} + u_{i,k-1}}{l^2}$$

在此约定 $g_{i,k} = g(ih, kl)$ 。于是方程 (1.1.1) 化成差分方程组

$$\left. \begin{aligned} \frac{u_{i-1,k} - 2u_{i,k} + u_{i+1,k}}{h^2} + \frac{u_{i,k-1} - 2u_{i,k} + u_{i,k+1}}{l^2} &= f_{i,k} \\ i &= 1, \dots, m-1 \quad k = 1, \dots, n-1 \\ u_{0,k} &= \varphi_{0,k} \quad u_{m,k} = \varphi_{m,k} \quad k = 1, \dots, n-1 \\ u_{i,0} &= \varphi_{i,0} \quad u_{i,n} = \varphi_{i,n} \quad i = 1, \dots, m-1 \end{aligned} \right\} \quad (1.1.2)$$

方程组 (1.1.2) 的系数矩阵每行至多有 5 个非零元素, 因此是稀疏矩阵。在用差分法解微分方程时, 一般都得到比较规则的稀疏矩阵。

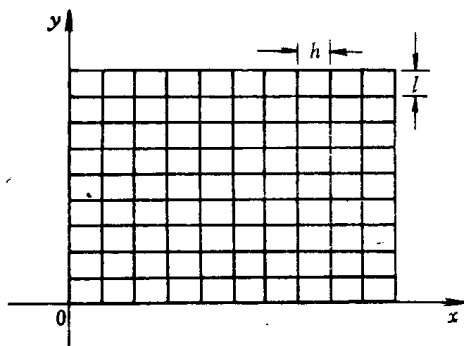


图 1.1.3

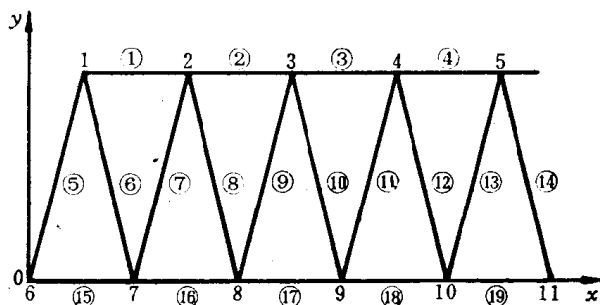


图 1.1.4

(2) 用有限元方法进行杆系结构分析时, 将导致求解下列形式的线性方程组:

$$Kd = P \quad (1.1.3)$$

其中, K 为结构整体刚度矩阵; P 为结点外力向量; d 为结点位移向量。我们以图 1.1.4 所示的平面桁架为例加以说明。取桁架上任一杆件 e , 其两端结点为 i, j 。设 e 的结点力向量 f 和结点位移向量 δ 分别为

它是一个对称的稀疏矩阵,密度约为 40%。但实际的杆系结构,结点要多得多,其密度可大为降低。

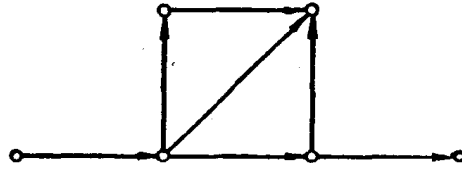


图 1.1.6 电网络的一部分

(3) 如图 1.1.6, 设有 m 个结点、 g_n 个源的电网络, 包含 n 条支路。设支路电压向量 $\mathbf{v}$ 、电流向量 $\mathbf{i}$ 为

$$\mathbf{v} = \begin{Bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_n \end{Bmatrix} \quad \mathbf{i} = \begin{Bmatrix} i_1 \\ i_2 \\ i_3 \\ \vdots \\ i_n \end{Bmatrix}$$

源的电压向量 $\mathbf{v}_g$ 和电流向量 $\mathbf{i}_g$ 为

$$\mathbf{v}_g = \begin{Bmatrix} v_{g_1} \\ v_{g_2} \\ v_{g_3} \\ \vdots \\ v_{g_n} \end{Bmatrix} \quad \mathbf{i}_g = \begin{Bmatrix} i_{g_1} \\ i_{g_2} \\ i_{g_3} \\ \vdots \\ i_{g_n} \end{Bmatrix}$$

根据欧姆定律

$$\mathbf{i} = G\mathbf{v} + \mathbf{i}_g - G\mathbf{v}_g \quad (1.1.4)$$

其中 $G = \text{diag}\left(\frac{1}{R_1}, \frac{1}{R_2}, \dots, \frac{1}{R_n}\right)$ 为导纳矩阵; R_i 为第 i 条支路的电阻。

现在设 $u_1, u_2, \dots, u_m$ 是结点电位值, 以结点 m 为参考点, 于是结点电位向量可记成 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_{m-1})^T$ 。我们进一步设(除去参考点)

$$b_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{电流沿支路 } j \text{ 流向结点 } i \\ -1 & \text{电流自结点 } i \text{ 沿支路 } j \text{ 流出} \\ 0 & \text{结点 } i \text{ 不在支路 } j \text{ 上} \end{cases}$$

形成一个 $(m-1) \times n$ 矩阵 $B = (b_{ij})$ 。根据克希霍夫电流定律, 在结点处的各支路电流的代数和为零, 因此有

$$B\mathbf{i} = 0 \quad (1.1.5)$$

而且显然有

$$B^T \mathbf{u} = \mathbf{v} \quad (1.1.6)$$

由式(1.1.4)~(1.1.6)容易得出

$$BGB^T \mathbf{u} = B(G\mathbf{v}_g - \mathbf{i}_g) \quad (1.1.7)$$

解方程(1.1.7)可以得到电位向量 $\mathbf{u}$, 代入式(1.1.6)、式(1.1.4), 即得电压向量 $\mathbf{v}$ 和电流向量 $\mathbf{i}$ 。

由于每个结点只有一部分支路交汇, B 必定是稀疏矩阵, 因此方程(1.1.7)的系数矩阵 $A = BGB^T$ 是一个稀疏矩阵。

(4) 如图 1.1.7, 设有一自来水管网, 以管道交汇点为结点。假定管网有 m 个结点, n 个管段。管段流量为 $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$, 每个结点 i 向管网外输出的流量为 q_i 。设 S_i 是管段比阻系数, 由第 i 管段的长度、直径和其它物理常数折算得到, 第 i 管段的压力降为

$$P_i = (\text{sign } Q_i) S_i Q_i^2 = S_i Q_i |Q_i| \quad (1.1.8)$$

在每个结点上流量的代数和为零, 因而有

$$BQ = q \quad (1.1.9)$$

这里 $Q = (Q_1, Q_2, \dots, Q_n)^T$; $q = (q_1, q_2, \dots, q_{m-1})^T$; 而系数矩阵 B 的元素定义为

$$b_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{水自管段 } j \text{ 流向结点 } i \\ -1 & \text{水自管段 } j \text{ 流出结点 } i \\ 0 & \text{结点 } i \text{ 不在管段 } j \text{ 上} \end{cases} \quad i=1, \dots, m-1; j=1, \dots, n$$

因而 B 是 $(m-1) \times n$ 的稀疏矩阵。

现在选择 $n-m+1$ 个独立的基本回路, 每个回路均可任意指定一个回路方向, 每个管段方向定义为水流方向, 设

$$l_{jk} = \begin{cases} +1 & \text{管段 } j \text{ 在回路 } k \text{ 中和回路同向} \\ -1 & \text{管段 } j \text{ 在回路 } k \text{ 中和回路方向相反} \\ 0 & \text{管段 } j \text{ 不属于回路 } k \end{cases}$$

则 $n \times (n-m+1)$ 矩阵 $L = (l_{jk})$ 也是稀疏矩阵。由于每个回路的压力降代数和为零, 我们可建立方程

$$L^T P = 0 \quad (1.1.10)$$

这里 $P = (P_1, P_2, \dots, P_n)^T$ 是压力降向量。

式 (1.1.9) 和式 (1.1.10) 共有 n 个方程, 因而利用式 (1.1.8) 可以解出 Q , 但是式 (1.1.10) 是一个 Q 的非线性方程, 求解时需要用迭代法。为此, 设 $Q^{(k)} = (Q_1^{(k)}, \dots, Q_n^{(k)})^T$ 满足式 (1.1.9), 任取一个 $n-m+1$ 维向量 $h = (h_1, \dots, h_{n-m+1})^T$, 令

$$Q = Q^{(k)} + Lh \quad (1.1.11)$$

利用关系式 $BL=0$, 可知 Q 也满足方程 (1.1.9)。将 Q 代入方程 (1.1.10) 后略去 h_i 的二次项, 并以 $\text{sign } Q_j^{(k)}$ 代替 $\text{sign } Q_j$, 我们可以得到线性方程组

$$L^T S_Q^{(k)} Lh = f^{(k)} \quad (1.1.12)$$

其中 $S_Q^{(k)} = \text{diag}(S_1 |Q_1^{(k)}|, \dots, S_n |Q_n^{(k)}|)$; $f^{(k)} = -\frac{1}{2} L^T S_Q^{(k)} Q^{(k)}$ 。由方程 (1.1.12) 解出 h 后, 令

$$Q^{(k+1)} = Q^{(k)} + Lh$$

代入方程 (1.1.12) 继续迭代直至收敛。

在方程 (1.1.12) 中, 由于 L 是稀疏矩阵, $S_Q^{(k)}$ 是对角阵, 因此 $A^{(k)} = L^T S_Q^{(k)} L$ 是对称的稀疏矩阵, 而且每个 $A^{(k)}$ 的稀疏结构都是一致的。

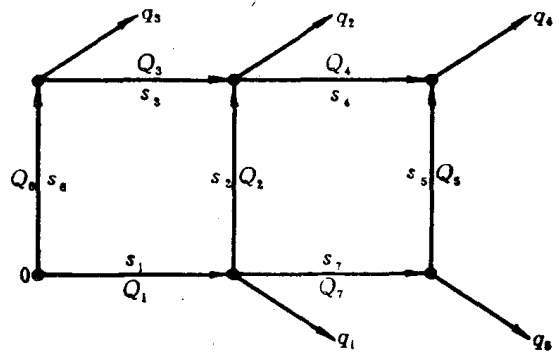


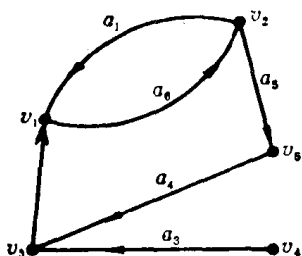
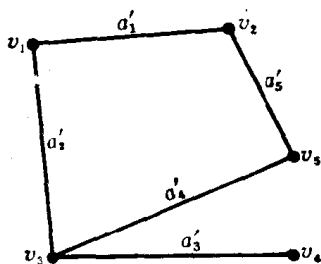
图 1.1.7 自来水管网模型

§ 1.2 图和稀疏矩阵

在上一节中, 我们已经提到, 矩阵的稀疏结构对矩阵元素的存贮管理和求解稀疏线性方程组的算法有很大影响。因此, 我们希望调换矩阵的行和列来改变矩阵的稀疏结构, 使之适合于选用的稀疏算法和存贮技术。这个问题, 往往可以用图论的方法得到解决^[50, 27, 9]。

一个 $m \times n$ 图 $G = G(V, E)$ 由 m 个顶点 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}$ 和 n 条弧 (也称为边或分枝) $E = \{\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \dots, \tilde{a}_n\}$ 所组成。每条弧 $\tilde{a}_j = (v_i, v_k)$ 由一对顶点组成, 表示 $\tilde{a}_j$ 与顶点 v_i, v_k 相连接, 而顶点 v_i, v_k 称为是邻接的。若 $\tilde{a}_j = (v_i, v_k)$ 的顶点是有序对, 即规定 $\tilde{a}_j$ 由 v_i 指向 v_k , 则称 G 为有向图, 否则 G 称为无向图。在无向图中 (v_i, v_k) 和 (v_k, v_i) 是不加区别的。因而表示同一条弧。

[例] 在图 1.2.1 中, 有向图 $G = G(V, E)$ 的 $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$, $E = \{\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \tilde{a}_3, \tilde{a}_4, \tilde{a}_5, \tilde{a}_6\}$; 其中 $\tilde{a}_1 = (v_2, v_1)$, $\tilde{a}_2 = (v_3, v_1)$, $\tilde{a}_3 = (v_4, v_3)$, $\tilde{a}_4 = (v_5, v_3)$, $\tilde{a}_5 = (v_2, v_5)$, $\tilde{a}_6 = (v_1, v_2)$ 。而在图 1.2.2 的无向图 $G' = G'(V', E')$ 中, $V' = V$, $E' = \{\tilde{a}'_1, \tilde{a}'_2, \tilde{a}'_3, \tilde{a}'_4, \tilde{a}'_5\}$; 其中 $\tilde{a}'_1 = (v_1, v_2)$, $\tilde{a}'_2 = (v_1, v_3)$, $\tilde{a}'_3 = (v_3, v_4)$, $\tilde{a}'_4 = (v_3, v_5)$, $\tilde{a}'_5 = (v_2, v_5)$ 。

图 1.2.1 有向图 G 图 1.2.2 无向图 G'

对于一个图 $G = G(V, E)$, 可以定义一个顶点邻接矩阵 B 如下:

$$b_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{若 } (v_i, v_j) \text{ 是 } G \text{ 的弧} \\ 0 & \text{若 } (v_i, v_j) \text{ 不是 } G \text{ 的弧} \end{cases}$$

图 1.2.1 的有向图 G 的结点邻接矩阵 B_G 和图 1.2.2 的无向图 G' 的顶点邻接矩阵 $B_{G'}$ 分别为

$$B_G = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad B_{G'} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

显然顶点邻接矩阵和图之间是一一对应的, 而且无向图的顶点邻接矩阵是对称的。

一个顶点可以为若干条弧的端点, 我们称以顶点 v_i 为其一端的弧的个数 d_i 是 v_i 的度 (degree), 显然 $d_i = \sum_{j=1}^n (b_{ij} + b_{ji})$ 。

设 v_1, v_2 是图 $G = G(V, E)$ 的顶点, G 的 l 条不同的弧的有序集合

$$\{(v_1, v_{h_1}), (v_{h_1}, v_{h_2}), \dots, (v_{h_{l-1}}, v_{h_l}), (v_{h_l}, v_2)\} \quad (1.2.1)$$

称为 v_1 和 v_2 间长为 l 的一条路径(path)。连接 v_1 、 v_2 的最短路径的长度称为 v_1 、 v_2 间的距离, 记为 $d(v_1, v_2)$ 。显然, 对于无向图必有 $d(v_1, v_2) = d(v_2, v_1)$ 。若图 G 的任何两个顶点间均存在一条路径, 则称 G 为连通图。对于连通图, 定义 $d = \max_{i,j} d(v_i, v_j)$ 为图 G 的直径。

在路径(1.2.1)中, 若 $v_1 = v_2$ 且 $v_1, v_h, \dots, v_{h-1}$ 是互不相同的顶点, 则称这种路径为回路。

今设 A 是 $n \times n$ 稀疏矩阵, 我们可以构造一个对应于 A 的有向图 $G(A) \equiv G(V, E)$, 这里 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, E 由下列顶点有序对组成:

$$E = \{(v_i, v_j) : v_i, v_j \in V \text{ 且 } a_{ij} \neq 0, i \neq j\}$$

在这个定义中, 隐含着图 $G(A)$ 顶点的编号和矩阵 A 的行序号一致, 因此 $G(A)$ 称为矩阵 A 的标记有向图。若 A 具有对称的稀疏结构, 则 $(v_i, v_j) \in E$ 时必有 $(v_j, v_i) \in E$, 因此可将 (v_i, v_j) 和 (v_j, v_i) 等同起来, 而不指定弧的方向, 于是 $G(A)$ 成为标记无向图。

显然, 若 B 是 $G(A)$ 的顶点邻接矩阵, 则当且仅当 $a_{ij} \neq 0$ 时 $b_{ij} = 1$, 这表示 B 和 A 具有相同的稀疏结构。由于改变顶点编号可以影响 B 的稀疏结构, 因而矩阵 A 的稀疏结构可以用图论方法得到改善, 一个典型例子是无向图的最佳编序问题。假定无向图 $G = (V, E)$ 有 n 个顶点, α 是 V 到 $\{1, 2, \dots, n\}$ 上的一个一一映照, 称为图 G 的顶点的一种编序。现在给定一个品质函数 $f(\alpha)$, 希望找到一个映照 $\bar{\alpha}$, 使得

$$f(\bar{\alpha}) = \min_{\alpha} f(\alpha)$$

品质函数可以根据不同的需要来确定, 例如, 可取

$$f(\alpha) = \max_i \beta_{\alpha(i)}$$

或

$$f(\alpha) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \beta_{\alpha(i)}$$

这里 $\beta_{\alpha(i)} = \max_j \{|\alpha(v_i) - \alpha(v_j)| : (v_i, v_j) \in E\}$ 。若 $G = G(A)$, 则 $\beta_{\alpha(i)}$ 表示 A 的第 i 行局部带宽, 上述品质函数导致带宽极小化问题。我们还可选择品质函数 $f(\alpha)$ 使得解稀疏线性方程组时的总存贮量或运算量极小化^[11], 因此图 $G(A)$ 的最佳编序问题在稀疏算法中占有重要地位。

在许多具体问题中, 考虑稀疏矩阵的块稀疏结构往往更为自然和有效。为此将稀疏矩阵写成分块矩阵的形式, 即 $A = (A_{ij})_{l \times l}$, 这里 A_{ij} 是 A 的子矩阵块, 其中有很多是零子矩阵。对此, 同样可构造有向图 $\tilde{G}(A) = \tilde{G}(V, E)$, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_l\}$, 而

$$E = \{(v_i, v_j) : v_i, v_j \in V \text{ 且 } A_{ij} \neq 0, i \neq j\}$$

图 $\tilde{G}(A)$ 的顶点邻接矩阵 $\tilde{B}$ 描述了 A 的块稀疏结构。通常 l 比 n 小得多, 因此处理 $\tilde{G}(A)$ 和 $\tilde{B}$ 更为经济。另外, 许多实际问题都和某种物理网格相联系, 网格的结点值代表方程组的未知元, 倘若按结点的自由度数分块, 即结点 l 的自由度为 d_l 时, 块 A_{ij} 为 $d_i \times d_j$ 矩阵。用这种方法容易直接由物理网格得到 $\tilde{G}(A)$ 。例如, 在平面桁架问题中, 杆系结构的结点即为图的顶点, 结点间的杆件可以看作作为图的弧。又如在用有限元方法解平面问题时, 简单三角形网格就可看作 $\tilde{G}(A)$, 若采用其它类型的单元, 则也可将单元各结点用弧连结构成 $\tilde{G}(A)$ 。例如, 元结点单元和由它产生的图为



图 1.2.3 元结点单元及其对应的图

§ 1.3 稀疏线性方程组解法的基本类型

稀疏线性方程组的解法分为迭代法和直接法两大类。前者以逐次超松弛法 (SOR)、共轭斜量法等为代表,后者以高斯消去法、修改的乔利斯基方法等为代表。一些正交化方法如豪斯霍尔德方法、吉文斯方法等主要用于最小二乘问题。近年来,在有限元素法中出现的自然分解方法,也以正交化方法为其基础。

要用直接法在计算机上有效地解稀疏线性方程组,必须解决下列三个问题^[57]:

- (1) 排列方程和未知元,使得对角元是一个合适的主元,而且在消元或分解过程中必须保持系数矩阵的稀疏性。在处理对称矩阵时,还要保持矩阵的对称性。
- (2) 尽量避免零元素的存贮和运算。
- (3) 存贮矩阵元素时,应使矩阵的一行和一系列元素能够有效地存取。因此要研究稀疏矩阵的存贮技术。

将各种存贮方案和种种直接解法结合起来解稀疏线性方程组,就产生许多稀疏算法。根据算法在解决上述问题时所采用的稀疏矩阵技术,可以将它们分为两大类^[54]:

1) 一般稀疏算法: 根据存贮量或运算量最少的准则排列方程和未知元,使得矩阵具有随机分布的稀疏结构。采用只存非零元素的压缩存贮方案,在解方程时能避免所有零元素的存贮和运算,效率较高,但程序技术复杂。

2) 带形或包络(envelope)算法: 通常先将方程按带宽极小的准则排列系数矩阵使成为一个带形矩阵,采用一维变带宽的存贮方案,由此产生的算法只能避免带外零元素的存贮和运算,但程序较简单,而且已发展了一种分块解法来处理高阶稀疏矩阵,因而在目前最为流行。

迭代法和直接法比较起来,突出的优点是程序简单,所需的机器存贮量小,主要的困难是收敛性问题。目前松弛法在解椭圆型边值问题时被广泛应用,只要适当选取松弛因子和采用加速技术,收敛速度还是很快的。共轭斜量法用于求解大型稀疏对称正定方程组时,也具有较好的效果,当矩阵性质不太坏时,对大的 n 通常用比 n 小得多的迭代次数就能得到满意的结果,因而也是常用的方法之一。

§ 1.4 稀疏矩阵的压缩存贮方法

大型稀疏矩阵一般是采用压缩形式进行存贮的,对于带形矩阵,只存贮带内的元素,对于随机分布的稀疏矩阵只存放矩阵的非零元素(包括非零子矩阵)和必要的检索信息。这种压缩存贮法明显的优点是:

- (1) 可以提高机器内、外存存放和处理大矩阵的能力。
- (2) 使矩阵中大量零元素不参加运算,从而节省大量机器时间。

在实际应用中,已经有了好多种压缩存贮法,现下面介绍几种较为有效的方法。

§ 1.4.1 等带宽存贮法

设 n 阶矩阵 A 为带形矩阵, 则存在一个最小正整数 m , 满足

$$a_{ij}=0, \quad |i-j| \geq m \quad (1.4.1)$$

我们称之为矩阵 A 的半带宽, 而称 $2m-1$ 为矩阵 A 的带宽, A 为对称矩阵时, 也常简称 m 为其带宽。

对于非对称矩阵, 压缩存贮可实现如下: 在带形的左上角和右下角增添若干任意元素, 使带形区域内每一行都有 $2m-1$ 个元素, 然后, 把它们逐行存放于矩形数组 $R[1:n, 1:s]$, 这里 $s=2m-1$ 。这样一种压缩存贮方法称为等带宽存贮方法。

例如, 已知带形矩阵

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & & & & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & & & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & & \\ & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} & \\ & & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} & a_{57} \\ & 0 & & a_{64} & a_{65} & a_{66} & a_{67} \\ & & & & a_{75} & a_{76} & a_{77} \end{bmatrix} \quad (1.4.2)$$

这里 $n=7, s=5$, 现按等带宽存贮形式存放, 则在矩形数组 $R[1:7, 1:5]$ 中有:

$$R[1:7, 1:5] = \begin{bmatrix} x & x & r_{13} & r_{14} & r_{15} \\ x & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} & r_{34} & r_{35} \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} & r_{44} & r_{45} \\ r_{51} & r_{52} & r_{53} & r_{54} & r_{55} \\ r_{61} & r_{62} & r_{63} & r_{64} & x \\ r_{71} & r_{72} & r_{73} & x & x \end{bmatrix} \quad (1.4.3)$$

式 (1.4.3) 中的 x 表示任意元素。

对于对称矩阵情形, 上述等带宽方法还可以利用对称性进一步减少存贮量, 我们只须在矩阵的下半带形的左上角添加一些元素, 使下半带形区域内每一行有 m 个元素, 然后把这些元素逐行存放于矩形数组 $R[1:n, 1:m]$ 。

带形区域内元素 a_{ij} 按上述存贮方法存于 $R[i', j']$, 其下标对应关系为

$$i' = i, \quad j' = j - i + m \quad (1.4.4)$$

§ 1.4.2 变带宽存贮法

K 为 n 阶对称矩阵, 考虑其下三角部分, 对每一个 i , 设 β_i 是满足

$$k_{ij}=0, \quad i-j \geq \beta_i \quad (1.4.5)$$

的最小正整数, 我们称之为第 i 行局部带宽。在矩阵 K 的各行中, 将左边第一个非零元到对角元的每个元素一行接一行排成一个元素序列 $\{a\} = \{a_1, a_2, \dots, a_\tau\}$, 这里, τ 是这些元素的总个数。同时把矩阵各行的对角元素在一维数组 $A[1:\tau]$ 中的序号排成一个地址序列

$\{d\} = \{d_1, d_2, \dots, d_n\}$, 存放于一维数组 $d[1:n]$, 显然 $d_i = \sum_{i=1}^j \beta_i$, $\tau = d[n]$ 。由于对每一个 i , β_i 一般是不同的, 因此称这样的压缩存贮方法为变带宽存贮方法。

例如, 图 1.4.1 的对称带形矩阵用变带宽存贮方法时, 它在一维数组 $A[1:17]$ 中的形式是:

$$\begin{bmatrix} k_{11} & & & & & & & & & & & & & & & & \\ & k_{21} & k_{22} & & & & & & & & & & & & & & \\ & & & k_{31} & 0 & k_{33} & & & & & & & & & & & \\ & & & & 0 & & k_{43} & k_{44} & & & & & & & & & \\ & & & & & 0 & & 0 & & k_{55} & & & & & & & \\ & & & & & & 0 & & 0 & & 0 & & k_{66} & & & & \\ & & & & & & & 0 & & & 0 & & & k_{77} & & & \end{bmatrix}$$

图 1.4.1

$A[1:17] = [k_{11}, k_{21}, k_{22}, k_{31}, 0, k_{33}, k_{43}, k_{44}, k_{55}, k_{62}, 0, 0, 0, k_{66}, k_{75}, 0, k_{77}]$, 相应存放对角元位置的一维数组, 具有形式:

$$d[1:7] = [1, 3, 6, 8, 9, 14, 17]。$$

K 矩阵的元素 k_{ij} 可通过 d 、 i 、 j 在 A 中找到, 当 $d[i] - (i-j) > d[i-1]$ 时, $d[i] - (i-j)$ 指示了 k_{ij} 在 A 中的位置。如果上面不等式不满足, 则 k_{ij} 不在带形区域内, 即 $k_{ij} = 0$ 。因此, k_{ij} 与 A 的分量的对应关系为

$$k_{ij} = \begin{cases} A[d[i] - i + j] & d[i] - i + j > d[i-1] \\ 0 & d[i] - i + j \leq d[i-1] \end{cases} \quad (1.4.6)$$

为方便起见, 可规定 $d[0] = 0$ 。

例如, 为要确定 k_{64} 在 A 中的位置, 可用式(1.4.6)计算得:

$$d[6] - (6-4) = 14 - 2 = 12$$

所以, k_{64} 在 A 中是 $A[12]$ 。

虽然变带宽存贮与等带宽存贮相比, 增加了一个数组 d , 但是在矩阵各行局部带宽 β_i 相差悬殊的情况下, 采用变带宽存贮方法要有利得多。

在要求存贮矩阵 K 上三角部分的情况下, 可以将上面叙述的方法修改为按列排列。由于矩阵 K 的对称性, 上三角按列或下三角按行形式的变带宽存贮方法并不引起 A 、 d 内容上的差异。

§ 1.4.3 索引存贮法

设稀疏矩阵 K 具有随机分布的稀疏结构, 按行将 K 的非零元素依次排成一个元素序列 $\{a\} = \{a_1, a_2, \dots, a_\tau\}$; 存放于一维数组 $A[1:\tau]$; 对应元素的列标排成序列 $\{CI\} = \{CI_1, CI_2, \dots, CI_\tau\}$, 存放于列索引数组 $CI[1:\tau]$; 每行第一个非零元在 A 中的序号排成序列 $\{RI\} = \{RI_1, RI_2, \dots, RI_n\}$, 存放于行指标数组 $RI[1:n]$ 。其中 τ 为 K 内非零元素总个数, n 为矩阵 K 的阶。这样的存贮方法称为索引存贮法^[50, 32], 索引存贮法一共需要占用的存贮单元为 $2\tau + n$ 个。若 A 是对称矩阵, 我们常将其对角元素存放于一维数组 $d[1:n]$, 而将其上三角部分的其余非零元素按行存放于 $A[1:\tau_1]$, 然后给出其行指标 $RI[1:n]$ 和列索引 $CI[1:\tau_1]$, 共占存贮单元 $2(n + \tau_1)$ 个。

例如, 对图 1.4.2 的矩阵