大型稀疏线性方程组符号 LU 分解法

张永杰，孙　秦
ZHANG Yong-jie，SUN Qin

西北工业大学 航空学院，西安 710072
School of Aeronautics，NPU，Xi'an 710072，China
E-mail：zyj19191@nwpu.edu.cn

ZHANG Yong-jie，SUN Qin.Symbol LU decomposition method of large scale sparse linear equations.Computer Engineering and Applications，2007，43（28）：29-30.

Abstract：Based on large scale sparse and symmetrical matrix of FEM equations，this paper takes the fully sparse strategy and minimum full-in entries algorithm such that makes lowest storing requirement to computer.For the sake of CPU operational time saving to accesses data in matrix decomposition，a symbol LU decomposing method is applied.The combination of the symbol LU decomposition and fully sparse storage structure can greatly improve the algorithmic efficiency for FEM solution of large scale sparse linear equation group.Numerical examples show that the method is available，effective and predominant for time and storage.Therefore it is applicable to solve systems of linear equations from FEM.
Key words：large scale sparse linear equations；fully sparse strategy；symbol LU decomposition

摘　要：基于有限元总刚矩阵的大规模稀疏性、对称性等特性，采用全稀疏存储结构以及最小填入元算法，使得计算机的存储容量达到最少。为了节省计算机的运算时间，对总刚矩阵进行符号 LU 分解方法，大大减少了数值求解过程中的数据查询。这种全稀疏存储结构和符号 LU 分解相结合的求解方法，使大规模稀疏线性化方程组的求解效率大大提高。数值算例证明该算法在时间和存贮上都较为占优，可靠高效，能够应用于有限元线性方程组的求解。
关键词：大型稀疏线性方程组；全稀疏存贮策略；符号 LU 分解
文章编号：1002-8331（2007）28-0029-02　**文献标识码**：A　**中图分类号**：TP301.6

有限元法作为工程分析的有效方法，已被广泛的应用于许多领域；随着研究对象的日益复杂，求解规模也不断扩大，其核心问题归结为如何高效求解大型稀疏线性方程组。

有限元稀疏线性方程组的求解效率很大程度上取决于稀疏矩阵的存贮策略，为了达到节省存贮空间和便于存取运算的目的，先后出现了对角元存贮法、等带宽存贮法、变带宽存贮法、坐标存贮法、Ellpack-Itpack 存贮法、CSR 存贮法[1]、Sherman's 存贮法[2]和超矩阵存贮法，而本文采用的全稀疏存贮策略[3]是一种结构简单的链表式存贮，充分利用了矩阵的稀疏性、对称性特点，不仅存贮规模小，而且便于元素查询、插入和删除操作，对于提高方程组的求解效率十分有利。

存储容量问题、计算时间问题和保证求解过程的数值稳定性这些问题，是稀疏化方程组解法中碰到的三大问题。这三大问题又有密切的联系，不能分开考虑，因为最优的存储方案可能是最费机器时间的，同样，一个数值稳定性最好的方法，可能破坏矩阵的稳定性。因此，必须在这三者之间进行适当的取舍和折中。在近几年，人们把著名的 LU 分解法推进了一步，采用模拟定序、符号 LU 分解[4,5]、数值 LU 分解等算法以及含有循环的程序设计方法，有效地解决了存储容量问题和计算时间问题，是目前比较好的稀疏线性化方程组解法之一。

本文的主要研究内容就是，采用全稀疏的存贮策略结合符号 LU 分解法求解有限元大型稀疏线性方程组，并用算例证实了这种解法不仅存贮规模小，而且求解效率高。

1　稀疏矩阵存贮方法

矩阵中只有少量的元素不为零，则称该矩阵为稀疏矩阵。有限元法求解的线性方程组一般都具有对称性和稀疏性的特点，针对这些特点可以采取只存贮稀疏矩阵对称部分非零元的全稀疏存贮策略。为了使存贮结构便于元素的查询、插入和删除操作，全稀疏存贮策略采用链表式管理，使整个存贮结构可以动态的更改。根据实际情况，可以选用单链表或是双链表的形式满足要求。下面以单链表（按行存贮）的形式为例说明这种存贮策略：

存贮实对称稀疏矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 需要建立四个一维数组：一个实型数组 DATA 和三个整型数组 JCOL、LINK、HEAD。

（1）实型数组 DATA 用于按行存贮稀疏矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 的下三角部分非零元；

（2）整型数组 JCOL 与实型数组 DATA 同长度，用于存贮

基金项目：国家自然科学基金（the National Natural Science Foundation of China under Grant No.10477018）。
作者简介：张永杰（1979-），男，博士生，研究方向：有限元大型稀疏线性方程组快速求解算法研究；孙秦（1956-），男，博导，研究方向：飞机结构设计。

这些非零元的列号；

（3）整型数组 LINK 与实型数组 DATA 长度，用于存贮每行中第 i 个非零元的下一个非零元在 DATA 数组中的位置，若第 i 个非零元是该行中的最后一个要存贮的元素，则 LINK(i)置为 0；

（4）整型数组 HEAD 有 n 个元素，用于存贮每行第一个非零元在 DATA 数组中的位置。

下面以一个简单的例子说明这些管理数组，设有实对称稀疏矩阵 $\boldsymbol{A}_{5\times5}$ 如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & a_{14} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 & a_{25} \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 & 0 \\ a_{41} & 0 & 0 & a_{44} & 0 \\ 0 & a_{52} & 0 & 0 & a_{55} \end{bmatrix}$$

表 1　只存贮矩阵 A 下三角部分非零元的全稀疏管理数组

NE	1	2	3	4	5	6	7	8
DATA	a_{11}	a_{21}	a_{22}	a_{33}	a_{41}	a_{44}	a_{52}	a_{55}
JCOL	1	1	2	3	1	4	2	5
LINK	0	3	0	0	6	0	8	0
HEAD	1	2	4	5	7			

从表 1 可看出全稀疏存贮策略是一种动态高效的存贮方案，不仅使存贮空间达到最小，而且能够方便地进行元素的查询、插入和删除操作，尤其针对有限元总刚矩阵的大规模稀疏性、对称性、带状性等特性，采用全稀疏存储结构以及最小填入元算法，使得计算机的存储容量达到最少，对于求解大型方程组十分有利。

2　符号 LU 分解法

对一般的矩阵 $\boldsymbol{LU}$ 分解过程可以用下面的计算公式给出：

设 $\boldsymbol{A}\in R^{n\times n}$，有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$ 分解，其中 $\boldsymbol{L}=(l_{ij})_{n\times n}$ 是单位下三角矩阵，$\boldsymbol{U}=(u_{ij})_{n\times n}$ 是上三角矩阵；则

$$\begin{cases} u_{1j}=a_{1j}\,(j=2,3,\cdots,n) \\ l_{i1}=\dfrac{a_{i1}}{u_{11}}\,(i=2,3,\cdots,n) \\ u_{kj}=a_{kj}-\displaystyle\sum_{t=1}^{k-1} l_{kt}u_{tj}\,(j=k,k+1,\cdots,n;k=2,3,\cdots,n) \\ l_{ik}=\dfrac{a_{ik}-\displaystyle\sum_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk}}{u_{kk}}\,(i=k+1,\cdots,n;k=2,3,\cdots,n) \end{cases}$$

但是在对稀疏矩阵进行实际数值 LU 分解之前，希望以最小的代价确定分解因子的非零元数据结构，从而避免在实际分解时对存储结构进行改动，这个过程称为符号 LU 分解。符号 LU 分解一般先进行模拟定序，具体做法：

（1）确定尽可能最佳分解顺序，也就是对节点重新编号，使得局部填入量最小，由于这种策略必须在分解过程中定序，所以必须模拟分解过程，但实际上不进行分解运算，只是寻找填入元，故叫作模拟定序。

（2）一旦确定了分解的节点，就要求所产生的填入元插入稀疏矩阵数据中，此外，还必须消除主列（或主行），也就是在稀疏矩阵数据中删除主列（或主行）的元素，以便使以后的 LU 分解能有效地进行。这就要求模拟定序过程对填入元建立起管理。

进行模拟定序的直接原因在于经常碰到多工况、非线性问题，要求多次地求解相同稀疏结构的稀疏方程组，每次系数矩阵的元素有变化，但稀疏结构不变。在求解整个问题时，模拟定序只需要进行一次，且通过模拟定序又能大大减少填入量，节省以后 LU 分解的计算量。所以花一定计算量在模拟定序上是非常合算的。

符号分解就是依据模拟定序得到的最佳分解顺序进行一次模拟分解，这个模拟分解的过程中并不进行具体元素数值的分解计算，只是把参与计算的各个元素的位置和计算出的填入元素位置找出来，并记录下来；同时将分解过程中消去的元素位置也记录下来，建立起一套针对数值 LU 分解存取数据的存储结构。其具体过程概括如下：

（1）首先根据模拟定序得到的最佳分解顺序，取出当前要进行操作的主行（主列），确定所消的主列（行）及主元。

（2）然后找出将要被消去的行（列），利用主元和主行（主列）的相应元素对这些行（列）进行消去。

（3）如此循环下去，直到分解结束。

通过上述符号 LU 分解过程建立起了一套数值 LU 分解的地址索引系统，能够大大减少数值求解过程中的数据查询，而采用简单直接的寻址方式，为数值 LU 分解创造了便利的条件。

3　数值算例

算例 1　平面受剪板模型，使用 8 节点平面单元，每节点 2 自由度，形成了 14 210 阶的线性方程组。

算例 2　平面带孔板模型，使用 8 节点平面等参单元，每节点 2 自由度，形成了 13 928 阶的线性方程组。

算例 3　三维受拉板模型，使用 20 节点体单元，每节点 3 自由度，分别形成了 107 856 阶的线性方程组。

算例 4　平面板弯模型，使用 8 节点壳单元，每节点 6 自由度，形成了 10 380 阶的线性方程组。

算例 5　平面受压板模型，使用 4 节点壳单元，每节点 6 自由度，形成了 12 546 阶的线性方程组。

算例 6　三点弯曲梁模型，使用 2 节点梁单元，每节点 3 自由度，形成了 5 295 阶的线性方程组。

表 2 给出了上述算例稀疏矩阵的存贮规模，可以明显看出，随着矩阵规模的增大，全稀疏存贮下的稀疏比例在减小，即：全稀疏存贮效率随着稀疏矩阵阶数的增加而增高。显然对于大规模或超大规模的稀疏矩阵，全稀疏存贮策略的存贮优势才表现得更加明显（表 2 中的稀疏比例为全稀疏存贮非零元数与矩阵总元素数的比值）。

表 2　存贮规模

算例	1	2	3	4	5	6
方程组阶数	14 210	13 928	107 856	10 380	12 546	5 295
存贮非零元数	225 220	219 477	8 381 539	492 523	335 152	26 485
稀疏比例/‰	1.115	1.131	0.721	4.571	2.129	0.945

表 3 给出了本文使用的符号 LU 分解法与常用直接解法的计算结果比较，可以看出，符号 LU 分解法的求解速度是最快的，这主要得益于符号 LU 分解法寻址方式的效率高，以及全稀疏存存贮结构下存取元素的便捷。所以，符号 LU 分解法结合全稀疏存贮策略求解大型稀疏线性方程组在运算时间和计算机存贮量上都具有明显优势（表 3 中运算时间以秒记）。

（下转 72 页）