scipy 稀疏矩阵详解

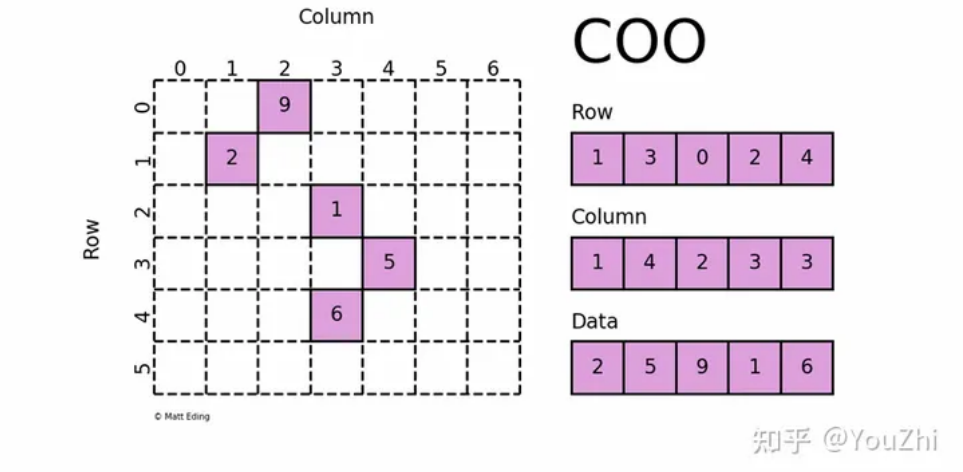
YouZhi
上海交通大学 工学博士

目录

稀疏矩阵格式

coo_matrix

coo_matrix（coordinate list matrix）是最简单的稀疏矩阵存储方式，采用三元组(row, col, data)(或称为ijv format)的形式来存储矩阵中非零元素的信息。在实际使用中，一般coo_matrix用来创建矩阵，因为coo_matrix无法对矩阵的元素进行增删改操作；创建成功之后可以转化成其他格式的稀疏矩阵（如csr_matrix、csc_matrix）进行转置、矩阵乘法等操作。



coo_matrix可以通过四种方式实例化，除了可以通过coo_matrix(D), D代表密集矩阵；coo_matrix(S), S代表其他类型稀疏矩阵或者coo_matrix((M, N), [dtype])构建一个shape为M*N的空矩阵，默认数据类型是d，还可以通过(row, col, data)三元组初始化：

```
>>> import numpy as np
>>> from scipy.sparse import coo_matrix

>>> _row  = np.array([0, 3, 1, 0])
>>> _col  = np.array([0, 3, 1, 2])
>>> _data = np.array([4, 5, 7, 9])
>>> coo = coo_matrix((_data, (_row, _col)), shape=(4, 4), dtype=np.int)
>>> coo.todense()  # 通过toarray方法转化成密集矩阵(numpy.matrix)
>>> coo.toarray()  # 通过toarray方法转化成密集矩阵(numpy.ndarray)
array([[4, 0, 9, 0],
       [0, 7, 0, 0],
```

```
       [0, 0, 0, 0],
       [0, 0, 0, 5]])
```

上面通过triplet format的形式构建了一个coo_matrix对象，我们可以看到坐标点(0,0)对应值为4，坐标点(1,1)对应值为7等等，这就是coo_matrix。coo_matrix对象有很多方法，大多数是elementwise的操作函数。

coo_matrix对象有以下属性：

- dtype dtype

矩阵中元素的数据类型

- shape 2-tuple

获取矩阵的shape

- ndim int

获取矩阵的维度，当然值是2咯

- nnz

存储值的个数，包括显示声明的零元素(注意)

- data

稀疏矩阵存储的值，是一个一维数组，即上面例子中的_data

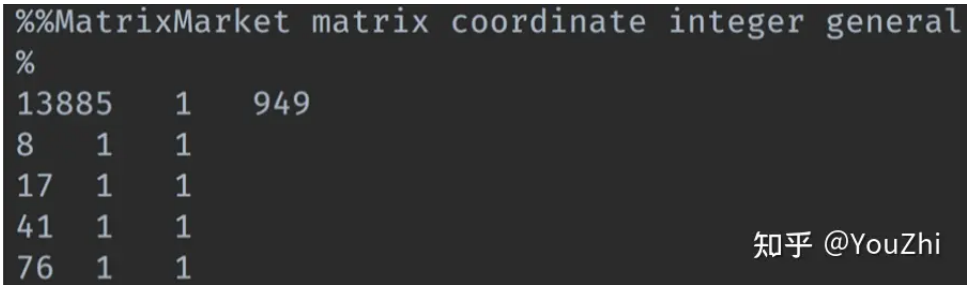
- row

与data同等长度的一维数组，表征data中每个元素的行号

- col

与data同等长度的一维数组，表征data中每个元素的列号

在实际应用中，coo_matrix矩阵文件通常存成以下形式，表示稀疏矩阵是coo_matrix(coordinate)，由13885行1列组成，共有949个元素值为非零，数据类型为整型。



下面给出coo_matrix矩阵文件读写示例代码，mmread()用于读取稀疏矩阵，mmwrite()用于写入稀疏矩阵，mminfo()用于查看稀疏矩阵文件元信息。(这三个函数的操作不仅仅限于coo_matrix)

```
from scipy.io import mmread, mmwrite, mminfo

HERE = dirname(__file__)
coo_mtx_path = join(HERE, 'data/matrix.mtx')
coo_mtx = mmread(coo_mtx_path)
print(mminfo(coo_mtx_path))
# (13885, 1, 949, 'coordinate', 'integer', 'general')
```

```
# (rows, cols, entries, format, field, symmetry)
mmwrite(join(HERE, 'data/saved_mtx.mtx'), coo_mtx)
```

coo_matrix的优点：

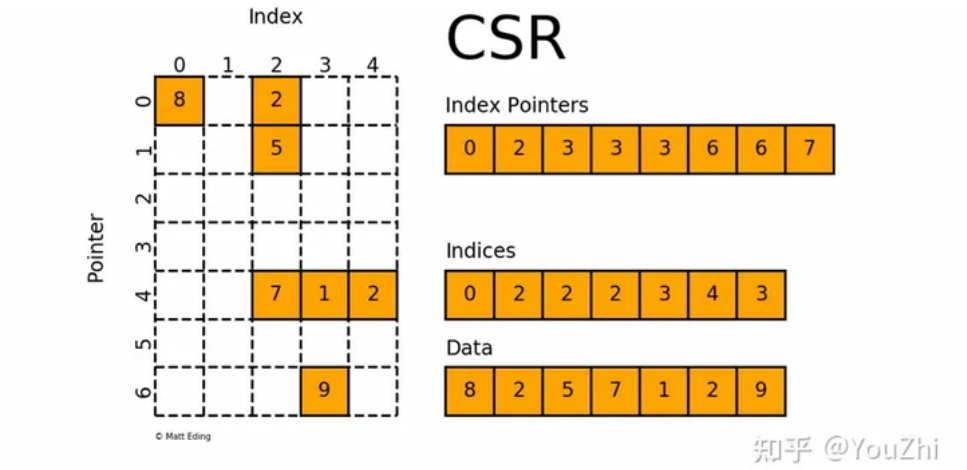
- 有利于稀疏格式之间的快速转换（tobsr()、tocsr()、to_csc()、to_dia()、to_dok()、to_lil()）
- 允许又重复项（格式转换的时候自动相加）
- 能与CSR / CSC格式的快速转换

coo_matrix的缺点：

- 不能直接进行算术运算

csr_matrix

csr_matrix，全称Compressed Sparse Row matrix，即按行压缩的稀疏矩阵存储方式，由三个一维数组indptr, indices, data组成。这种格式要求矩阵元按行顺序存储，每一行中的元素可以乱序存储。那么对于每一行就只需要用一个指针表示该行元素的起始位置即可。indptr存储之前行中非零值的累积计数（**indptr[j] 编码第 j 行上方非零的总数，indptr长度为矩阵的行数加1；indptr[j]等价于第j 行数据元素在indices中的起始位置，indptr[j+1]等价于第j 行数据元素在indices中的终止位置**），indices是按行顺序存储每行中数据的列号，与data中的元素一一对应。



csr_matrix可用于各种算术运算：它支持加法，减法，乘法，除法和矩阵幂等操作。其有五种实例化方法，其中前四种初始化方法类似coo_matrix，即通过密集矩阵构建、通过其他类型稀疏矩阵转化、构建一定shape的空矩阵、通过(row, col, data)构建矩阵。

其第五种初始化方式这是直接体现csr_matrix的存储特征：csr_matrix((data, indices, indptr), [shape=(M, N)])，意思是，矩阵中第i行非零元素的列号为indices[indptr[i]:indptr[i+1]]，相应的值为data[indptr[i]:indptr[i+1]]

举个例子：

```
>>> import numpy as np
>>> from scipy.sparse import csr_matrix

>>> indptr = np.array([0, 2, 3, 6])
>>> indices = np.array([0, 2, 2, 0, 1, 2])
>>> data = np.array([1, 2, 3, 4, 5, 6])
>>> csr = csr_matrix((data, indices, indptr), shape=(3, 3)).toarray()
array([[1, 0, 2],
       [0, 0, 3],
       [4, 5, 6]])
```

csr_matrix同样有很多方法，其中tobytes()，tolist(), tofile()，tostring()值得注意，其他具体参考官方文档。

csr_matrix对象属性前五个同coo_matrix，另外还有属性如下：

- indices

与属性data一一对应，元素值代表在某一行的列号

- indptr

csr_matrix各行的起始值，length(csr_object.indptr) == csr_object.shape[0] + 1

- has_sorted_indices

- 判断每一行的indices是否是有序的，返回bool值

csr_matrix的优点：

- 高效的算术运算CSR + CSR，CSR * CSR等

- 高效的行切片

- 快速矩阵运算

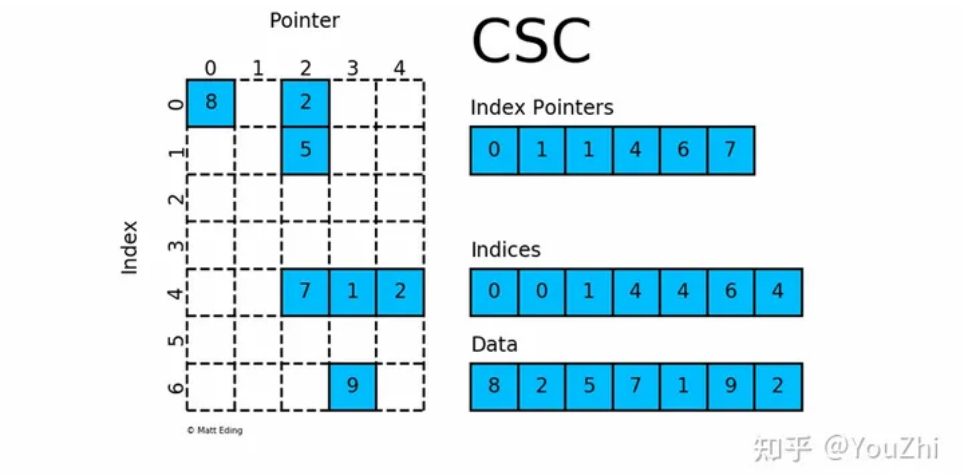
csr_matrix的缺点：

- 列切片操作比较慢（考虑csc_matrix）

- 稀疏结构的转换比较慢（考虑lil_matrix或doc_matrix）

csc_matrix

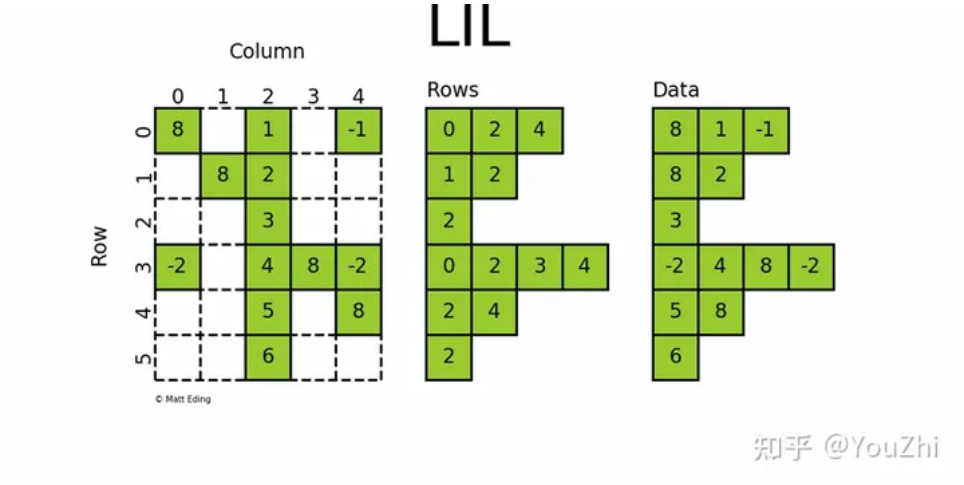
csc_matrix和csr_matrix正好相反，即按列压缩的稀疏矩阵存储方式，同样由三个一维数组indptr, indices, data组成，如下图所示：



其实例化方式、属性、方法、优缺点和csr_matrix基本一致，这里不再赘述，它们之间唯一的区别就是按行或按列压缩进行存储。而这一区别决定了csr_matrix擅长行操作；csc_matrix擅长列操作，进行运算时需要进行合理存储结构的选择。

lil_matrix

lil_matrix，即List of Lists format，又称为Row-based linked list sparse matrix。它使用两个嵌套列表存储稀疏矩阵：data保存每行中的非零元素的值，rows保存每行非零元素所在的列号(列号是顺序排序的)。这种格式很适合逐个添加元素，并且能快速获取行相关的数据。其初始化方式同coo_matrix初始化的前三种方式：通过密集矩阵构建、通过其他矩阵转化以及构建一个一定shape的空矩阵。



lil_matrix可用于算术运算：支持加法，减法，乘法，除法和矩阵幂。

其属性前五个同coo_matrix，另外还有rows属性，是一个嵌套List，表示矩阵每行中非零元素的列号。

LIL matrix本身的设计是用来方便快捷构建稀疏矩阵实例，而算术运算、矩阵运算则转化成CSC、CSR格式再进行，构建大型的稀疏矩阵还是推荐使用COO格式。

LIL format优点

支持灵活的切片操作行切片操作效率高，列切片效率低

稀疏矩阵格式之间的转化很高效（tobsr()、tocsr()、to_csc()、to_dia()、to_dok()、to_lil()）

LIL format缺点

- 加法操作效率低 (consider CSR or CSC)
- 列切片效率低(consider CSC)
- 矩阵乘法效率低 (consider CSR or CSC)

dok_matrix

dok_matrix，即Dictionary Of Keys based sparse matrix，是一种类似于coo matrix但又基于字典的稀疏矩阵存储方式，key由非零元素的的坐标值tuple(row, column)组成，value则代表数据值。dok matrix非常适合于增量构建稀疏矩阵，并一旦构建，就可以快速地转换为coo_matrix。其属性和coo_matrix前四项同；其初始化方式同coo_matrix初始化的前三种：通过密集矩阵构建、通过其他矩阵转化以及构建一个一定shape的空矩阵。对于dok matrix，可用于算术运算：它支持加法，减法，乘法，除法和矩阵幂；允许对单个元素进行快速访问（O(1)）；不允许重复。

举例：

```
>>> import numpy as np
>>> from scipy.sparse import dok_matrix

>>> np.random.seed(10)
>>> matrix = random(3, 3, format='dok', density=0.4)
```

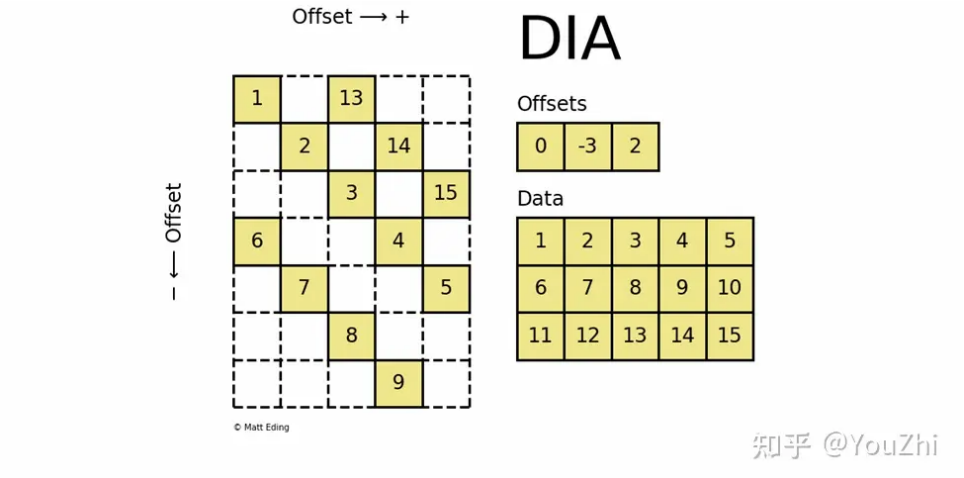
```
>>> matrix[1, 1] = 33
>>> matrix[2, 1] = 10
>>> matrix.toarray()
array([[ 0.        ,  0.        ,  0.        ],
       [ 0.        , 33.        ,  0.        ],
       [ 0.19806286, 10.        ,  0.22479665]])
>>> dict(matrix)
{(2, 0): 0.19806286475962398, (2, 1): 10.0, (2, 2): 0.22479664553084766, (1, 1)

>>> isinstance(matrix, dict)
True
```

在上面代码最后可以看到，实际上dok_matrix实例也是dict实例，在实现上继承了dict类。

dia_matrix

dia_matrix，全称Sparse matrix with DIAgonal storage，是一种对角线的存储方式。如下图中，将稀疏矩阵使用offsets和data两个矩阵来表示。offsets表示data中每一行数据在原始稀疏矩阵中的对角线位置k（k>0, 对角线往右上角移动；k<0, 对角线往左下方移动；k=0，主对角线）。该格式的稀疏矩阵可用于算术运算：它们支持加法，减法，乘法，除法和矩阵幂。



dia_matrix五个属性同coo matrix, 另外还有属性offsets；dia_matrix有四种初始化方式，其中前三种初始化方式同coo_matrix前三种初始化方式，即：通过密集矩阵构建、通过其他矩阵转化以及构建一个一定shape的空矩阵。

第四种初始化方式如下：

dia_matrix((data, offsets), shape=(M, N)) ,

其中，data[k,:]存储着稀疏矩阵offsets[k]对角线上的值

举例：

```
>>> data = np.arange(15).reshape(3, -1) + 1
>>> offsets = np.array([0, -3, 2])
>>> dia = sparse.dia_matrix((data, offsets), shape=(7, 5))
>>> dia.toarray()
array([[ 1,  0, 13,  0,  0],
       [ 0,  2,  0, 14,  0],
       [ 0,  0,  3,  0, 15],
       [ 6,  0,  0,  4,  0],
       [ 0,  7,  0,  0,  5],
```

```
       [ 0,  0,  8,  0,  0],
       [ 0,  0,  0,  9,  0]])
```

bsr_matrix

bsr_matrix，全称Block Sparse Row matrix，这种压缩方式极其类似CSR格式，但使用分块的思想对稀疏矩阵进行按行压缩。所以，BSR适用于具有dense子矩阵的稀疏矩阵。该种矩阵有五种初始化方式，分别如下：

- bsr_matrix(D, [blocksize=(R,C)])

D是一个M*N的二维dense矩阵；blocksize需要满足条件：M % R = 0和N % C = 0，若不给定该参数，内部将会应用启发式的算法自动决定一个合适的blocksize.

- bsr_matrix(S, [blocksize=(R,C)])

S是指其他类型的稀疏矩阵

- bsr_matrix((M, N), [blocksize=(R,C), dtype])

构建一个shape为M*N的空矩阵

- bsr_matrix((data, ij), [blocksize=(R,C), shape=(M, N)])

data 和ij 满足条件： a[ij[0, k], ij[1, k]] = data[k]

- bsr_matrix((data, indices, indptr), [shape=(M, N)])

data.shape一般是k*R*C，其中R、C分别代表block的行和列长，k代表有几个小block矩阵；第i行的块列索引存储在indices[indptr[i]:indptr[i+1]]，其值是data[indptr[i]: indptr[i+1]]。

bsr_matrix可用于算术运算：支持加法，减法，乘法，除法和矩阵幂。如下面的例子，对于许多稀疏算术运算，BSR比CSR和CSC更有效。

举例：

```
>>> from scipy.sparse import bsr_matrix
>>> import numpy

>>> indptr = np.array([0, 2, 3, 6])
>>> indices = np.array([0, 2, 2, 0, 1, 2])
>>> data = np.array([1, 2, 3, 4, 5, 6]).repeat(4).reshape(6, 2, 2)

>>> bsr_matrix((data,indices,indptr), shape=(6, 6)).toarray()
array([[1, 1, 0, 0, 2, 2],
       [1, 1, 0, 0, 2, 2],
       [0, 0, 0, 0, 3, 3],
       [0, 0, 0, 0, 3, 3],
       [4, 4, 5, 5, 6, 6],
       [4, 4, 5, 5, 6, 6]])
```

可以通过热图观察矩阵有没有明显分块模式再决定使不使用该方式。

bsr matrix对象拥有9个属性，前四个属性与coo matrix相同，另外还有以下属性(注意csr matrix和bsr matrix之间的区别与联系)：

- data

即稀疏矩阵的数组，data.shape一般是k*R*C

- indices

与属性data中的k个二维矩阵一一对应，元素值代表在某一行的列号

- indptr

bsr各行起始起始值

- blocksize

即tuple(R,C)

- has_sorted_indices

判断每一行的indices是否是有序的，返回bool值

实用函数

- 构造特殊稀疏矩阵

scipy.sparse模块还包含一些便捷函数，用于快速构建单位矩阵、对角矩阵等，下面做一个简单的汇总：

方法	用途
identity(n[, dtype, format])	生成稀疏单位矩阵
kron(A, B[, format])	sparse matrices A 和 B 的克罗内克积
kronsum(A, B[, format])	sparse matrices A 和 B 的克罗内克和
diags(diagonals[, offsets, shape, format, dtype])	构建稀疏对角阵
spdiags(data, diags, m, n[, format])	构建稀疏对角阵，同上，但不可指定 shape
block_diag(mats[, format, dtype])	mats 为 iterable, 包含多个矩阵，根据 mats 构建块对角稀疏矩阵。
tril(A[, k, format])	以稀疏格式返回矩阵的下三角部分
triu(A[, k, format])	以稀疏格式返回矩阵的上三角部分
bmat(blocks[, format, dtype])	从稀疏子块构建稀疏矩阵
hstack(blocks[, format, dtype])	水平堆叠稀疏矩阵(column wise)
vstack(blocks[, format, dtype])	垂直堆叠稀疏矩阵 (row wise)
rand(m, n[, density, format, dtype, ···])	使用均匀分布的值生成给定形状和密度的稀疏矩阵
random(m, n[, density, format, dtype, ···])	使用随机分布的值生成给定形状和密度的稀疏矩阵
eye(m[, n, k, dtype, format])	生成稀疏单位对角阵（默认 DIAgonal format）

scipy.sparse.bmat举例：

```
In [1]: A = np.arange(8).reshape(2, 4)
In [2]: T = np.tri(5, 4)
In [3]: L = [[8] * 4] * 2
In [4]: I = sparse.identity(4)
In [5]: Z = sparse.coo_matrix((2, 3))
In [6]: sp.bmat([[   A,    Z,    L],
    ...:          [None, None,    I],
    ...:          [   T, None, None]], dtype=int)
Out[7]:
<11x11 sparse matrix of type '<class 'numpy.int64'>'
        with 33 stored elements in COOrdinate format>

In [8]: _.toarray()  # ipython previous output
Out[9]:
array([[0, 1, 2, 3, 0, 0, 0, 8, 8, 8, 8],
       [4, 5, 6, 7, 0, 0, 0, 8, 8, 8, 8],
```

```
        [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0],
        [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0],
        [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0],
        [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1],
        [1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0],
        [1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0],
        [1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0],
        [1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0],
        [1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]])
```

- 稀疏矩阵类型判断

scipy.sparse模块还包含一些判断稀疏矩阵类型的函数，这里需要注意的是，issparse() 和 isspmatrix() 是相同的函数，也许是由于历史原因保留下来了两个。

o isspars(x)

o isspmatrix(x)

o isspmatrix_csc(x)

o isspmatrix_csr(x)

o isspmatrix_bsr(x)

o isspmatrix_lil(x)

o isspmatrix_dok(x)

o isspmatrix_coo(x)

o isspmatrix_dia(x)

- 稀疏矩阵存取

load_npz(file) 从.npz文件中读取稀疏矩阵

save_npz(file, matrix[,compressed]) 将稀疏矩阵写入.npz文件中

- 其他

find(A) 返回稀疏矩阵中非零元素的索引以及值

经验总结

- 要有效地构造矩阵，请使用dok_matrix或lil_matrix

lil_matrix类支持基本切片和花式索引，其语法与NumPy Array类似；lil_matrix形式是基于row的，因此能够很高效的转为csr，但是转为csc效率相对较低。

- 强烈建议不要直接使用NumPy函数运算稀疏矩阵

如果你想将NumPy函数应用于这些矩阵，首先要检查SciPy是否有自己的给定稀疏矩阵类的实现，或者首先将稀疏矩阵转换为NumPy数组（使用类的toarray()方法）。

- 要执行乘法或转置等操作，首先将矩阵转换为CSC或CSR格式，效率高

CSR格式特别适用于快速矩阵矢量计算