MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutató Intézete, **Közlemények** 11. (1973)

RITKA MÁTRIXOK INVERTÁLÁSA

dr. Gergely József

BEVEZETÉS

A műszaki gyakorlatban felmerül olyan mátrixok invertálásának igénye, amelyek kevés nem 0 elemet tartalmaznak. Ezekben az esetekben nem célszerű az általános invertálási eljárásokat használni, mert sok felesleges munkát végzünk azzal, hogy a sok 0 elemmel is úgy számolunk, mintha azok 0-tól különbözőek lennének. Ritka (vagy sparse) mátrixok invertálására, valamint ilyen mátrixú lineáris egyenletrendszerek megoldására nagyon sok módszert kidolgoztak. Az [1] és [2] ezzel a témával foglalkozó konferencia anyagait tárgyalja és mintegy 200 irodalmi hivatkozást tartalmaz. Jelen dolgozatban egy ismert képlet ritka mátrixok esetében való célszerű használatát ismertetjük.

MÓDSZER

a) Legyen ismert az $n \times n$-es A mátrix inverze $A^{-1} = D$. Módosítsuk A-t egy $\underline{u}\,\underline{v}^T$ diáddal ($\underline{u}$ oszlop, $\underline{v}^T$ sorvektor). [1]-ben, [3]-ban és még sok irodalomban található a jól ismert következő összefüggés:

$$(1) \qquad (A + \underline{u}\,\underline{v}^T)^{-1} = D - \frac{1}{1 + \underline{v}^T D \underline{u}} D \underline{u}\,\underline{v}^T D,$$

amit ritka mátrixok esetében célszerűen használhatunk.

Adjunk az A mátrix i-edik sorának j-edik eleméhez b-t. Legyen az $\underline{u}$ vektor i-edik komponense 1, a többi 0, a $\underline{v}^T$ vektor j-edik komponense b, a többi 0, vagyis $\underline{u} = \underline{e}_i, \underline{v}^T = b\underline{e}_j^T$ (ahol $\underline{e}_i$ az i-edik egységvektor). Ebben az esetben (1) a következő speciális alakot ölti:

$$(2) \qquad (A + b\underline{e}_i\underline{e}_j)^{-1} = D - \frac{b}{1 + bd_{ji}} \underline{d}_i \underline{d}_j^T$$

ahol d_{ji} a D mátrix j-edik sorának i-edik eleme, $\underline{d}_i$ az i-edik oszlop $\underline{d}_j^T$ pedig a j-edik sorvektora.

A (2) képlet szukcesszive alkalmazható. Ha a A sparse mátrix fődiagonálisában nem 0 elemek vannak, vehetjük az A_1 kiinduló mátrixnak az A fődiagonálisából álló mátrixot. Ennek inverze (D_1) is diagonális (az eredeti mátrix diagonális elemeinek reciprokaiból áll). Vegyünk ezután egy nem 0 fődiagonálison kívüli elemet és alkalmazzuk (1)-et. (1) nagyon egyszerűen hajtható végre, ugyanis minthogy D_1 diagonálmátrix, $d_{ji} = 0, \underline{d}_i$ és $\underline{d}_j^T$ egyetlen nem 0 elemet tartalmazó vektorok. Ezután vegyünk egy újabb fődiagonálison kívüli nem 0 elemet stb. Az eljárást annyiszor kell ismételni, ahány nem 0 elem van. (1) számolása továbbra is nagyon egyszerű lesz, de minden egyes lépés újabb nem 0 elemeket hozhat be a kialakuló inverzbe, az inverz telítetté válhat.

A számolás közben szingularitás lép fel, ha (1)-ben $1 + bd_{ji} = 0$ lesz. Ekkor viszont módunkban áll más nem 0 elemet választani, esetleg ideiglenesen egy nem 0 elemet felvenni, amit később visszaalakíthatunk 0-vá.

Ha az A mátrix fődiagonálisában 0 is van, akkor ezek helyett A_1-be nem 0 elemeket veszünk fel, majd egy későbbi lépésben visszaalakíthatjuk a 0-t.

b) *Több nem 0 elem egyidejű választása*

Legyenek az A i-edik sorában álló $j_1, j_2, \dots, j_k$ oszlopindexű elemek 0-tól különbözőek, legyenek $b_1, b_2, \dots, b_k$, a többi 0. Ekkor $\underline{u} = \underline{e}_i$ míg

$$\underline{v}^T(0 \dots 0\underset{j_1}{b_1}0 \dots 0\underset{j_2}{b_2}0 \dots \underset{j_k}{b_k}0 \dots 0) \text{ alakú lesz.}$$

(1) jobboldalán álló tört ebben az esetben

$$\frac{1}{1 + \underline{v}^T D \underline{u}} = \frac{1}{1 + \sum_{s=1}^{k} b_s d_{j_s i}}$$

$D \underline{u}\, \underline{v}^T D$ pedig olyan diád lesz, melynek baloldali oszlopvektora $\underline{d}_i$, a jobboldali sorvektora pedig

$$\left(\sum_{s=1}^{k} b_s d_{j_s 1}, \sum_{s=1}^{k} b_s d_{j_s 2}, \dots, \sum_{s=1}^{k} b_s d_{j_s n} \right),$$

vagyis a D mátrix $j_1, j_2, \dots, j_k$-adik sorának $b_1, b_2, \dots, b_k$ együtthatókkal vett lineáris kombinációja. E szerint az A mátrix sorainak fődiagonálison kívüli nem 0 elemei egyidejűleg számításba vehetők.

Több nem 0 egyidejű választása egyszerűsíti a számolást, mert soronkint csak egy osztást és egy szingularitás vizsgálatot kell végezni, míg különben annyiszor, ahány nem 0 elem van.

Az ismertetett módszer számológépeken könnyen programozható, amit a CDC 3300-ra el is végeztünk. A számolásba bevonandó nem 0 elemek sorrendje az inverzképzésnél tetszőlegesen választható, amivel a szingularitási problémák elkerülhetők.

Egy nem 0 elem vagy egy sorban lévő nem 0 elemek bevonása a számolásba a kialakuló inverzet egy diád szorzattal módosítja. A diád komponenseit(legalább is a számolás elején) sok 0 elemet tartalmaznak, ami a diádképzés során felhasználható.

ALGORITMUS A b) ESETRE

Az egy sorban álló nem 0 elemeknek a számolásba való bevonásánál célszerű a sorok növekvő sorrendjét követni. Vegyük figyelembe, hogy a már meglévő inverzet, D_k-t módosító diád baloldali oszlopvektora a D_k egy oszlopa. Ha az első sor nem 0 elemeivel kezdünk, akkor az első lépésben $i = 1$ és D_1 első oszlopának ($\underline{d}_1$-nek) csak az első eleme nem 0, így a diád egy sora (első) lesz 0-tól különböző és csak azoknál az oszlopoknál, amelyek indexe megegyezik a bevonandó nem 0 elemek oszlop indexeivel. A második lépésben $i = 2$ és $\underline{d}_2$ első és második eleme különbözhet 0-tól stb. A diád jobboldali sorvektora is erősen hézagos lesz (legalább is a számolás kezdetén) mert a D_k sorainak lineáris kombinációiból képződik, amik viszont csak 1 nem 0 elemet tartalmaznak (a diádikus elemet) mindaddig amíg az eredeti mátrix azonos indexű sorában szereplő nem 0 elemek a számolásba nem kerültek.

MEGJEGYZÉS

A módszer és annak különösen az a) változata célszerűen alkalmazható, ha egy ismert inverzű mátrix egy, vagy kevés számú elemét kell változtatni.

Irodalom

[1] Ralph A. Willoughby: Procedings of the Symposium on Sparse Matrices and Their Applications, Held at the IBM Watson Research Center September 9-10 1968.

[2] J. K. Reid: Large sparse sets of linear equations Proceedings of the Oxford conference; April 1970. Academic press, London 1971.

[3] Faddeev, D. K., and Faddeeva, V. N.: "Vücsiszlityelnüe metodü linejnoj algebrü, Leningrad 1963.

Beérkezett: 1973. október 1.

Summary

INVERSION OF SPARSE MATRICES

It is suggested to apply the relation (1) to the inversion of sparse matrices. The paper analyses case a) when the formula is used by inserting of a non-zero element and case b) when we use the relation (1) by inserting of more non-zero elements from the same row.

Резюме

ОБРАЩЕНИЕ РЕДКИХ МАТРИЦ

Для обращения редких матриц целесообразно использовать выражение /I/. Статья разбирает случаи употребления этого выражения:

а/ при вводе одного ненулевого элемента и

б/ при вводе одновременно в одну строку нескольких ненулевых элементов.