論　文

スパース行列処理における Gauss 消去法の修正*

田 所　昭** 野 田　松太郎***

Abstract

The sparse Gaussian elimination is considered from the viewpoint of number of non-zeros added in its elimination process. The slightly different algorithm in the elimination processes is proposed by using the properties ot sparse matrices. Some theorems on the number of non-zercs added in new algorithm are given. It is shown the algorithm proposed here is much more efficient than traditional sparse Gaussian elimination.

1. まえがき

計算機の大型化につれ，有限要素法，線形計画法，待ち行列理論等が広く用いられ，スパース構造を利用した大規模行列に対する演算手法の確立が急がれている．

特に大次元連立一次方程式について，そのスパース処理技法を大別すると，間接解法である反復法と，Gauss 消去法等の直接解法とになる[1]．しかし，反復法においては一般に解の収束の保障がないため現在では Gauss 消去を中心とする直接解法が主に用いられている．Gauss 消去法をスパース構造を持つ連立一次方程式の解法として用いる場合の問題点は，消去演算中の fill-in，すなわち新らしい非零要素の発生にあり，これを最小にすることが記憶容量，計算時間の短縮等の「計算の手間」の削減につながるため，最近の関心はもっぱらこの点にあり，最適 pivot 順序を決定するいろいろな手法が示され，非零要素の増加に対し，かなりの改善がみられる[2]．しかし，基本的に Gauss 消去法のアルゴリズムから消去演算中における未消去部分への fill-in は特殊な場合以外は避けられない．

本稿では Gauss 消去法の問題点を指摘し，その消去順序を変更したアルゴリズムを提案する．このアルゴリズムにより，非零要素の発生に対し，大きな改良がなされることを考察する．

2. Gauss 消去法

通常の Gauss 消去法の第1段階は，$n\times n$ 行列 $A=\{a_{ij}\}$ の三角化で，各段階の操作は一般に次のように表わすことができる．

$$A^{(k+1)}=L_kA^{(k)} \qquad (k=1,2,\cdots,n) \tag{1}$$

$$A^{(1)}=A,\ A^{(n+1)}=U\ (\text{単位上三角行列})$$

$A^{(k)}$ は第 $k-1$ 段階まで三角化が終了しており，L_k は k 列目の対角項以下を除くと単位行列と同じ構造を持ち，その要素 $\eta_i^{(k)}$ は $A^{(k)}$ の k 列目の対角項以下の要素を零にするように決められる．$L_k, A^{(k)}$ の構造は **Fig. 1** のようになり，各々の要素は次の手順で求められる．

$$\eta^{(k)}=1/a_{kk}^{(k)}$$

$$\eta_i^{(k)}=-a_{ik}^{(k)}\eta_k^{(k)} \qquad (i=k+1,\cdots,n)$$

$$a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}+\eta_i^{(k)}a_{kj}^{(k)} \qquad \begin{pmatrix} i=k+1,\cdots,n \\ j=k+1,\cdots,n \end{pmatrix}$$

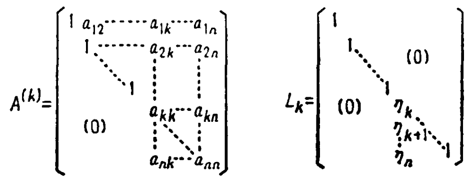

Fig. 1 Matrices completed k-th step in traditional Gaussian elimination.

---

* The modification of Gaussian elimination on sparse matrices by Akira TADOKOROand Matu-Tarow NODA (Department of Electronic, Engineering, Faculty of Engineering, Ehime University, Authors' oresent addresses are as follows; A. TADOKORO (Software works, HITACHI, LTD) and M. T. NODA (Faculty of Engineering, Kyoto University)

** 愛媛大学工学部電子工学科（現在，(株)日立製作所ソフトウェア工場）

*** 愛媛大学工学部電子工学教室（現在，京都大学工学部数理工学教室）

(2)

以下の便宜のため，(1)，(2)により規定されるアルゴリズムを「通常の Gauss 消去法」という．このアルゴリズムをスパース行列に適用した場合の問題点は，第k段階において第k行以下の各行に対しても消去操作を行うため，最終的に消去される対角項以下の fill-in による非零要素を計算中に，いったん記憶する必要があることにあり，それが計算に必要な記憶容量を増大させてしまう．

3. 修正 Gauss 消去法

2. に述べた問題点を考慮し，アルゴリズムの修正を行う．通常の Gauss 消去法では消去の第 k 段階で，k 列目の対角項以下の要素を消去したが，このように列に関する消去を行わず，第k段階でk行目に対し消去操作を行うようアルゴリズムを修正する．

各段階の操作は 2. に述べたと同様，

$$\bar{A}^{(k+1)}=\bar{L}_k\bar{A}^{(k)}\quad(k=1,2,\cdots,n)\qquad(3)$$
$$\bar{A}^{(1)}=A,\ \bar{A}^{(n+1)}=U\ \text{(上三角行列)}$$

と表わされる．$\bar{A}^{(k)}$ は第 $k-1$ 行まで三角化が終了しており，第k行以下は初期行列 A のk行以下と全く等しく消去操作による演算を受けていない．$\bar{L}_k$ は第 k 行の1列目から対角項までを除いては単位行列と同じで，それらの構造は **Fig. 2** に示される．ここで $\bar{L}_k$ の要素 $l_i^{(k)}$ は $\bar{A}^{(k)}$ の第 k 行の1列目から対角項までを零にするよう決定される．すなわち，$\bar{L}_k$，$\bar{A}^{(k+1)}$ の要素は，$k=2,\cdots,n$ に対して，

$$\begin{aligned} l_i^{(k)}&=-a_{ki}/a_{ii} && (i=1,2,\cdots,k-1)\\ a_{kj}&=a_{kj}+a_{ij}\cdot l_i^{(k)} && (j=i+1,\cdots,n)\end{aligned}\qquad(4)$$

となる．ここで，(4)の右辺に表われる行列 $\bar{A}$ の要素は最も新らしく計算された量を用いる．すなわち，第k消去段階においては，前段階までに求まっている行列 $\bar{A}$ の第1行より第 $k-1$ 行までを用い，a_{k1} から $a_{k,k-1}$ の各要素を消去するよう，$l_1^{(k)},\cdots,l_{k-1}^{(k)}$ を定め順次消去操作を遂行することになる．この結果得られた a_{kj} $(j=k,\cdots,n)$ が $\bar{A}^{(k+1)}$ の第k行の要素となる．ここで，$a_{kk}\doteqdot 0$ の要素に対しては，列交換による pivoting をおこなう．以上のように(3)，(4)により規定されるアルゴリズムが本稿で提案するものであり，以下「修正 Gauss 消去法」という．このアルゴリズムによりつくられる三角行列は，$\bar{L}_k$ の正則性を考慮すると，通常の Gauss 消去法の場合と同じであり，この方法による演算回数も通常の Gauss 消去法と等しく，$n^3/3+O(n^2)$ となる[3]．このことは，遂行される消去演算が通常の Gauss 消去法と順序のみが異なるということに対応している．この点を明確にするため，両アルゴリズムの概略を以下に示す．ただし，実際の便宜上，一部変数を変更している．

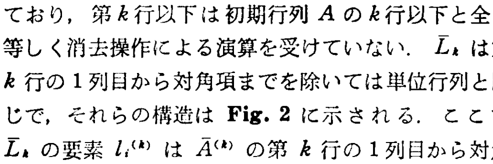

Fig. 2 Matrices completed k-th step in modified Gaussian elimination.

通常の Gauss 消去法

```
—for k=1, …, n
   —for j=k+1, …, n
        a_kj = a_kj / a_kk
   —for i=k+1, …, n
      —for j=k+1, …, n
           a_ij = a_ij − a_ik a_kj
```

修正 Gauss 消去法

```
—for k=1, …, n
   —for i=1, …, k−1
      —for j=i+1, …, n
           a_kj = a_kj − a_ki a_ij
   —for j=k+1, …, n
        a_kj = a_kj / a_kk
```

なお，上と同様な手順の変更は，Crout 分解法等にも適用しうることを付記しておく．

4. アルゴリズムの比較

3. に述べた修正 Gauss 消去法の大きな特長は，第k段階において，k行にのみ消去操作を行い，$k+1$行以下の行に対しては，全く演算を行わないことにあり，このため行列のスパース性を保存するのに非常に効果がある．

4.1 シミュレーション結果

スパース性保存の状況を見るため，非零要素が初期行列全体にわたり，ランダムに分布する場合のシミュレーション結果が $n=100$ に対し **Fig. 3** (次頁参照)に示される．ただし，対角要素は全て非零とし，対角要素以外の各要素の非零確率を P_0 とする．**Fig. 3** より明らかなように，通常の Gauss 消去法(実線)に比較すると，本稿で提案した修正 Gauss 消去法(破線)

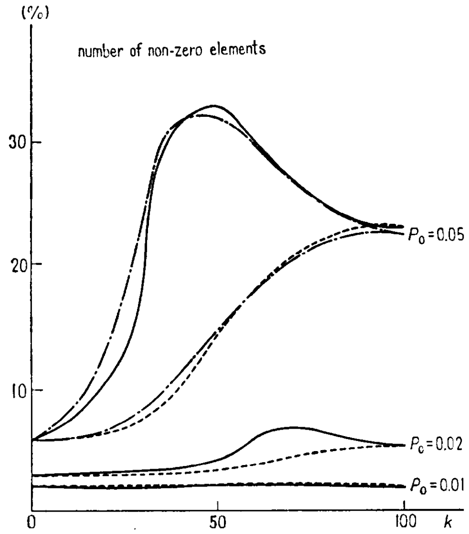

Fig. 3 Simulation results; Number of non-zeros versus elimination step (k) for the Gaussian (solid line) and the modified Gaussian (dotted line) eliminations (n=100). A comparison of the probability density (ref. 4)) by two algorithms is also shown.

では，最大非零要素数が少なく，かつ発生する非零要素数の増加はほぼ単調である．

さらに，第 k 消去段階終了後の k 行が含む非零要素の確率を $P(k)$，初期行列の非零要素の確率を P_0 と表わすと，各段階における非零要素数は容易に得られる．通常の Gauss 消去法によるものを N_{SG}，修正 Gauss 消去法によるものを N_{MG} とすると，

$$N_{SG}=n+\sum_{i=1}^{k} P(i)(n-i)+P(k)(n-k)^2 \qquad (5)$$

$$N_{MG}=n+\sum_{i=1}^{k} P(i)(n-i)+(n-k)(n-1)P_0 \qquad (6)$$

となる．N_{SG}, N_{MG} を P_0=0.05 に対して求めた結果は，**Fig. 3** の一点鎖線となり，シミュレーション結果とほぼ一致する．ここで確率 $P(k)$ は，スパース・ランダム行列に対してグラフ理論的考察より，消去段階 k と確率 P_0 のみに依存し[4)]，

$$\begin{aligned} P(k)&=1-\sum_{i=1}^{k}\binom{k-1}{i-1}H_i(1-P_0)^{i(k+1-i)}, \\ H_i&=1-\sum_{j=1}^{i-1}\binom{i-1}{j-1}H_j(1-P_0)^{j(i-j)},\ H_1=1 \end{aligned} \qquad (7)$$

と書かれうるとした．

4.2 非零要素数

シミュレーション結果をもとに，両アルゴリズムの消去の第 k 段階での非零要素数，N_{SG}, N_{MG} の間の関係および修正 Gauss 消去法での最大非零要素数について下記の定理を得る．

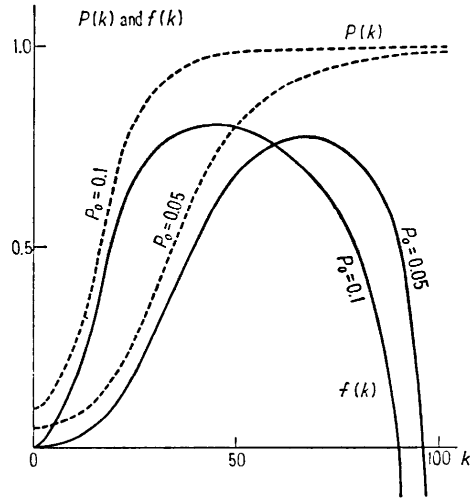

Fig. 4 $f(k)$ by (8) with solid line and $P(k)$ with dotted line for n=100 and P_0=0.1 and 0.05.

〔定理 1〕 修正 Gauss 消去法により発生する非零要素数は消去段階のほぼ全域にわたって，通常の Gauss 消去法により発生するものより少ない．

（証明） (5)，(6) に求めた非零要素数の差を計算し，$N_{SG}>N_{MG}$ の条件を求めると，

$$f(k)=P(k)-\frac{n-1}{n-k}P_0>0 \qquad (8)$$

(7) より，$P(k)$ は，P_0 と k の関数であり，n に無関係である．一般に $P(k)\fallingdotseq 1$ となる k は n 以下であると仮定し (8) を満足する k の限界値を求める．この事情を見るため段階 k に対し，n=100，P_0=0.1，0.05 での $f(k)$ および $P(k)$ が **Fig. 4** に示される．よって $f(k)>0$ は，

$$1-\frac{n-1}{n-k}P_0>0 \qquad (9)$$

と書かれうる．これより

$$k<(1-P_0)n+P_0\fallingdotseq(1-P_0)n \qquad (10)$$

すなわち，(10) を満たす k による消去の第 k 段階までは，$N_{SG}>N_{MG}$ となる．特に，スパース行列では $P_0\ll 1$ であり，かつ，$1\leq k\leq n-1$ を考えると，k のほぼ全域にわたって，$N_{SG}>N_{MG}$ が成立する．図

〔定理 2〕 修正 Gauss 消去法により発生する最大非零要素数は，

$$\max N_{MG}=n+\sum_{i=1}^{n-1} P(i)(n-i). \qquad (11)$$

(証明) (6)より，消去の各段階終了後増加する非零要素数は

$$\delta N = P(k)(n-k) - P_0(n-1) \qquad (12)$$

非零要素数が増加する条件 ($\delta N>0$) は，上と同様

$$k \le \bar{k} = (1-P_0)n + P_0 \qquad (13)$$

すなわち，$k=\bar{k}$ まで，N_{MG} は k と共に単調増加する．(9)と同様に，$P(\bar{k})=1$ とおけるので，(12)より $k<\bar{k}$ に対しては $\delta N>0$, $k>\bar{k}$ に対しては $\delta N<0$ を得る．最大非零要素数は $k=\bar{k}$ で生じ，

$$\max N_{MG} = N_{MG}|_{k=\bar{k}}$$
$$= n + \sum_{i=1}^{\bar{k}} P(i)(n-i) + P_0^2(n-1)^2$$

ここで(13)および，上式右辺第2項より，$\bar{k}=n-1$ としうる (**Fig. 4** 参照)．さらに，$P_0 \ll 1$ (スパース性)を考え，(11)を得る．☒

5. まとめ

スパース行列処理に関する通常の Gauss 消去法の消去順序を変更することにより，発生する非零要素数に関して，ほぼ消去の全域にわたり，かなり改良されたアルゴリズムを提案した．この修正 Gauss 消去法による最大非零要素数も求められ，これは通常の Gauss 消去法によるものよりはるかに少ない (**Fig. 3** 参照)．したがって，修正 Gauss 消去法は大規模スパース行列の処理において，非常に優れているといえる．

さらに，実際の数値計算において，pivot 順序，α，の決定については，文献 2) にしたがって，pivot 順序 α により得られる上三角行列の行 i の非零要素数を $r(i)_\alpha$ としたとき，

$$\sum_{i=1}^{n-1} r(i)_\alpha$$

を最小とするよう，α をとればよいことがわかる．又，修正 Gauss 消去法を用いると，縮約されたデータ構造[5] への詰め直し操作が各段階で一つの行のみに関し，さらに行に関して順になされうるため，詰め直しに要する時間が短縮される．すなわち，一般にプログラミングが簡単といわれる，行／列インデックス方式[6] 等が容易に利用しうる．

謝辞 本研究に対し有益な御意見，御討論，御援助を頂いた本学工学部相原恒博教授，有吉 弘教授に深謝する．

参考文献

1) 大附辰夫，川北建次：スパース行列処理技法 (1)，情報処理，Vol. 17, pp. 42～49 (1976)
2) J. R. Bunch: Complexity of Sparse Elimination, in "Complexity of sequential and Parallel Numerical Algorithms", Academic Press Inc., pp. 197～220 (1973)
3) 例えば，山本哲朗："数値解析入門"，サイエンス社，pp. 33～38 (1976)
4) I. S. Duff: On the number of non-zeros added when Gaussian Elimination is performed on sparse random matrices, Math. Comp. Vol. 28, pp. 218～230 (1974)
5) 大附辰夫，川北建次：スパース行列処理技法 (2)，情報処理，Vol. 17, pp. 142～152 (1976)
6) J. M. McNamee: A sparse Matrix Package, Comm. ACM, Vol. 14, pp. 265～273 (1971)

(昭和 52 年 1 月 31 日受付)
(昭和 52 年 4 月 22 日再受付)