ショート・ノート

スパース行列における最適ピボット順序決定の一考察*

黒瀬能聿** 北橋忠宏*** 田中幸吉***

Abstract

Many methods have been proposed for the optimal pivoting problem in sparse matrices, but there are ploblems from the viewpoint of the ordering time and fill-in.

In this paper, we describe these ploblems and propose a method which leads to a reduction of the ordering time and the overall fill-in during *LU* factorization by Gaussian elimination. Comparison is made with two other methods.

1. まえがき

スパース (sparse) 行列のピボット (pivot) 順序決定手法に関する論文は，従来より数多く報告されているが[1)~10)]，これらの手法は，ピボット順序決定時間，フィルイン (fill-in) の点で問題がある．

本稿では，それらの問題点を明らかにし，ピボット順序決定時間の短縮を計ると同時に，フィルインの発生も少い一つの手法を提案する．さらに，提案した手法，既存の Hsieh の手法[9)]も併せプログラムし，計算機で実行した結果について報告する．

2. 従来の手法の問題点

いま，n 次の正方行列 A を Gauss 消去法による LU 分解することを考える．ただし，A はスパースで非特異行列であるとする．

定　義 1　行列 A に対し，$r-1$ 段階の分解過程が終了した行列を $A^{(r)}$ で，$A^{(r)}$ の (i, j) 要素を $a_{ij}^{(r)}$ で表わす．

定　義 2　行列 B_r は，$A^{(r)}$ の最後の $n-r+1$ 次の部分行列における非零要素を 1 に，零要素を 0 に対応させて得られる $n-r+1$ 次のブール行列とする．

LU 分解過程で零要素から，非零要素に変化する生成非零要素をフィルインと呼ぶが，このフィルインに関して次の定義を与える．

定　義 3　任意の $a_{ij}^{(r)} \neq 0$ をピボットにしたときのフィルインの集合を $F_{ij}^{(r)}$，この集合の要素の個数を $|F_{ij}^{(r)}|$ で表わす．

この定義より，最適ピボット順序というのは，LU 分解が終了した時点でのフィルインの全個数を F とするとき，次式を満足するピボット系列 $\{a_{ij}^{(1)}, a_{ij}^{(2)}, \cdots, a_{ij}^{(n)}\}$ を求めることである．

$$F=\min[|F_{ij}^{(1)}|+|F_{ij}^{(2)}|+\cdots +|F_{ij}^{(r)}|+\cdots+|F_{ij}^{(n)}|] \qquad (1)$$

一般に，最適ピボット順序を決定するには多くの手数を必要とし，実用的でない．できるだけ少い手数で最適に近い順序を決定するために，従来よりいろいろな手法が提案されているが，これらは決定論的手法[2),4),5),7)~10)]と確率論的手法[1),3),6),7),9)]に大別される．前者は次の定理における行列 $N^{(r)}$ 中，最小値をもつ要素をピボットとする手法である．

定　理 1[7),8)]　もし $a_{i+r-1,j+r-1}^{(r)} \neq 0$ を LU 分解の r 段階目のピボットとするなら，その段階で生じるフィルインの個数は，$\bar{B}_r^t$ を B_r の 0 と 1 を反転した行列の転置行列とするとき，次式で得られる行列 $N^{(r)}$ の (i, j) 要素 $n_{ij}^{(r)}$ で与えられる．

$$N^{(r)}=[n_{ij}^{(r)}]=B_r\cdot\bar{B}_r^t\cdot B_r \qquad (2)$$

一方，後者に対する基準としては，次の定理が知られている．

定　理 2[6),7)]　もし $a_{i+r-1,j+r-1}^{(r)} \neq 0$ を LU 分解の r 段階目のピボットとするなら，その段階で生じ

* On Optimal Pivoting Order for Sparse Matrices. Yoshinobu KUROSE (Hiroshima Mercantile Marine College). Tadahiro KITAHASHI and Kohkichi TANAKA (Faculty of Engineering Science, Osaka University)
** 広島商船高等専門学校
*** 大阪大学基礎工学部情報工学科

るフィルインの個数の上限は，i_r を全要素が1である $n-r+1$ 次の列ベクトル，$i_r{}^t$ をその転置ベクトルとするとき，次式で得られる行列 $\hat{N}^{(r)}$ の (i, j) 要素 $\hat{n}_{ij}{}^{(r)}$ で与えられる．

$$\hat{N}^{(r)}=[\hat{n}_{ij}{}^{(r)}]=(B_r\cdot i_r-i_r)\cdot(i_r{}^t\cdot B_r-i_r{}^t) \quad (3)$$

次に，この二つの定理を基準として用いる場合の問題点を明らかにする．

(a) ピボット順序決定時間

ピボット順序決定時間を決めるのは，ピボット要素を決定する各段階での $N^{(r)}$ と $\hat{N}^{(r)}$ の計算時間であるから，この計算に必要な積演算手数が目安となる．

n が十分大きい場合，定理1では，積演算手数 σ_1 は近似的に $n^4/2$ となり，定理2では，積演算手数 σ_2 は近似的に n^3 となる．

σ_1 と σ_2 の比を ρ とおくと，

$$\rho=\frac{1}{2}n \quad (4)$$

となり，決定論的手法は，確率論的手法に比較して約 $n/2$ 倍の手数を必要とする．

(b) フィルインの個数

定理1の $N^{(r)}$ は実際のフィルインの個数を表わし，定理2の $\hat{N}^{(r)}$ はフィルインの個数の上限を表わしているので，ピボット順序決定時間とは逆に確率論的手法は，決定論的手法に比較しフィルインの個数が多くなる．

3. 準最適ピボット順序決定アルゴリズム

以上の議論から明らかなように，従来の手法は，ピボット順序決定時間とフィルインの点で問題がある．そこで以下では，これに対処する一つの手法について考察する．

ある要素 $a_{i+r-1, j+r-}{}^{(r)}\neq 0$ をピボットにしたときのフィルインの位置を求める次の定理が成立する．

定　理 3　もし $a_{i+r-1, j+r-1}{}^{(r)}\neq 0$ を LU 分解の r 段階目のピボットとするなら，その段階で生じるフィルインは，$e_i{}^t$ と e_j をそれぞれ $n-r+1$ 次の単位行列の i 行目，j 列目とするとき，次式で得られる行列 $P^{(r)}$ で1の存在する位置に発生する．

$$P^{(r)}=(B_r\cdot e_j)\cdot(e_i{}^t\cdot B_r)-B_r \quad (5)$$

ただし，ここでの引算は $0-0=0$，$1-1=0$，$1-0=1$，$0-1=0$) に従うものとする．

証　明　定義から $e_i{}^t\cdot B_r$，$B_r\cdot e_j$ は B_r の i 行目，j 列目を表わすので，もし $b_{pj}{}^{(r)}=b_{iq}{}^{(r)}=1$ なら，積 $(B_r\cdot e_j)\cdot(e_i{}^t\cdot B_r)$ の (p, q) 要素は1となり，その他の要素は0となる．実際にフィルインとなるのは，積 $(B_r\cdot e_j)\cdot(e_i{}^t\cdot B_r)$ の (p, q) 要素が1であり，$b_{pq}{}^{(r)}=0$ の場合であるから，B_r を引くことにより，$b_{pq}{}^{(r)}=1$ の場合は除去される．また積 $(B_r\cdot e_j)\cdot(e_i{}^t\cdot B_r)$ の (k, l) 要素が0で，$b_{kl}{}^{(r)}=1$ の場合はフィルインに無関係なので $0-1=0$ と定めた．(証明終)

すでに述べたように，定理1では全非零要素のフィルインを求めているので，演算手数が多くなり，大規模行列になると実用的でない．さりとて，定理2だけを基準にすれば，フィルインは必ずしも最少とならない．

そこで，全非零要素についてフィルインの個数を考慮するのではなく，まず定理2の $\hat{N}^{(r)}$ の中から min $[\hat{n}_{ij}{}^{(r)}]$ となる $\hat{n}_{\alpha\beta}{}^{(r)}$ に対応する要素 $b_{\alpha\beta}{}^{(r)}$ の集合を求める．次に，その集合の全要素について，定理3によりフィルインの位置と個数を求めて，その中からフィルイン最少の要素 $b_{ij}{}^{(r)}$ に対応する要素 $a_{i+r-1, j+r-1}{}^{(r)}$ をピボットにする．この考え方に基づく具体的手法を以下に述べる．

1)　B_r の行と列の非零要素数を示す二つのベクトル $G_r(=B_r\cdot i_r)$ と，$H_r(=i_r{}^t\cdot B_r)$ を作る．

2)　ピボットとして G_r の中から，$g_i{}^{(r)}=1$ の要素を捜す．もしあれば **4)** に行き，なければ H_r の中から，$h_j{}^{(r)}=1$ の要素を捜す．もしあれば **4)** へ行き，なければ次へ．

3)　全非零要素について $(g_i{}^{(r)}-1)\cdot(h_j{}^{(r)}-1)$ を計算し，この中から最小の値をもつ要素の集合を求め，その集合の全要素の中からフィルイン最少の要素を取り出し**4)**へ行く．もしフィルイン最少要素が複数個あれば，max$[h_j{}^{(r)}]$ をもつ要素を取り出し **4)**へ行く．なければ終了．

4)　取り出された要素を $a_{i+r-1, j+r-1}{}^{(r)}$ とすれば，B_r の i 行 j 列の全要素を消去し，フィルインがあれば，それを B_{r+1} に加え，$B_r\leftarrow B_{r+1}$ として **1)**に戻る．

4. 計算機による実行結果

上述のアルゴリズムに基づく手法 A，既存の手法 P[6),9]，D[5),9]を併せプログラムし，FACOM 230/45S で実行した結果が **Table 1** (次頁参照) である．また行列のサイズ n と非零要素数 NZ が比例する行列について，n とピボット順序決定時間 T の関係を図示したものが **Fig. 1** (次頁参照) である．この図によれば，手法DとPのピボット順序決定時間の比は約 $n/3$

Table 1 Comparison of Three Methods

Matrix size	Nonzeros	Ordering time T (sec)			Fill-in F		
n	NZ	Probabilistic method P	Author's method A	Deterministic method D	Probabilistic method P	Author's method A	Deterministic method D
20	56	0.079	0.093	0.413	10	10	10
40	130	0.294	0.341	3.587	61	59	59
50	132	0.119	0.379	2.690	49	48	47
60	228	0.837	1.740	22.240	152	142	142
80	298	1.328	2.963	38.932	208	202	198
100	296	1.411	1.842	18.958	130	124	122
100	370	2.156	4.389	78.670	306	306	310
100	381	2.552	5.528	191.466	433	425	421
200	648	6.142	11.609	246.311	524	521	523
300	940	13.359	35.216	909.542	940	921	930
400	1,270	26.296	115.509	3,404.036	1,612	1,542	1,550
500	1,612	44.961	363.408	—	2,434	2,292	—

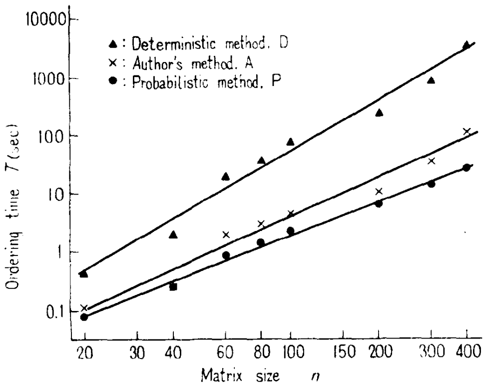

Fig. 1 Relation between ordering time T and Matrix size n

となり，(4)式の結果とほぼ一致する．また手法AとPの比は約 $n^{0.33}/2$，手法DとAの比は約 $0.72n^{0.64}$ となった．

5. むすび

Table 1 から明らかなように，本稿で提案したスパース行列のピボット順序決定手法は，決定論的手法の長所であるフィルインの個数の僅少性をわずかに犠牲にしながら，確率論的手法の長所を取り入れることにより，ピボット順序決定時間を大幅に短縮している．

一般に大規模スパース行列は一回だけ LU 分解されることはまれで，同一の非零パターンで繰り返し分解されることが多い．この場合，丸め誤差の軽減，実行時間短縮の観点からは，非零要素は少い程良い．このため，提案した手法においては，行列の大形化に伴ない，確率論的手法よりはピボット順序決定時間が増大することも，フィルインの数が少いことで補償されているといえよう．この意味で本手法は十分実用的であると考える．

最後に，いろいろと討論頂いた大阪大学田中研究室永見均氏，浅野哲夫氏，小川均氏を始め，研究室各位に深謝する．

参考文献

1) W. F. Tinney & J. W. Walker: Direct Solutions of Sparse Network Equations by Optimally Orderd Triangular Factrization, Proc. IEEE, Vol. 55, No. 1, pp. 1801～1809(1967).
2) R. D. Berry: An Optimal Ordering of Electronic Circuits Equations for a Sparse Matrix Solution, IEEE Trans., Vol. CT-18, No. 1, pp. 40～50 (1971).
3) J. K. Reid(eds.): Large Sparse Sets of Linear Equations, p. 282, Academic Press (1971).
4) 坂本，白川，尾崎：スパースな連立方程式におけるピボット操作の順序づけ，情報処理，Vol. 13, No. 3, pp. 154～160 (1972).
5) H. Y. Hsieh & M. S. Ghausi: On Optimal Pivoting Algorithms in Sparse Matrices, IEEE Trans., Vol. CT-19, No. 1, pp. 93～96 (1972).
6) H. Y. Hsieh & M. S. Ghausi: A Probabilistic Approach to Optimal Pivoting and Prediction of Fill-ins for Random Sparse Matrices, IEEE Trans, Vol. CT-19, No. 4, pp. 329～336 (1972).
7) R. P. Tewarson: Sparse Matrices, p. 160, Academic Press (1973).
8) M. Nakhla, K. Singhal & J. Vlach: An Optimal Pivoting Order for the Solution of Sparse Systems of Equations. IEEE Trans., Vol. CAS-21, No. 2, pp. 222～225 (1974).
9) H. Y. Hsieh: Pivoting-Order Computation Method for Large Random Sparse Systems,

IEEE Trans., Vol. CAS-21, No. 2, pp. 225～230 (1974).

10) 喜屋武，白川，尾崎：最適ピボッティング順序問題とこれに付随する2部ネットワーク，信学論 (A), Vol. 57-A, No. 12, pp. 864～871 (1974).

11) 黒瀬，北橋，田中：スパース行列における最適ピボット順序決定の一手法，昭和 50 年電気学会全国大会講演論文集 No. 1415.

(昭和50年2月5日受付)
(昭和50年9月8日再受付)