

ショート・ノート

論文「スパース行列の確率的考察」について\*

金田 悠紀夫\*\*

Abstract

We are interested in the Gaussian elimination method for the solution of sparse linear equations.

In this paper we describe the probabilistic distribution of non-zero elements on the Gaussian elimination process and some simulation results.

We find some differences between the results of the paper "A Probabilistic Consideration of Sparse Matrix" and ours, and discuss about them.

1. まえがき

大規模なスパース行列に関する計算の重要性がますますつれて最近大形スパース行列の計算法に関する論文が多く発表されはじめています。

椎野氏の論文「スパース行列の確率的考察」<sup>1)</sup>では連立一次方程式をガウスの消去法を用いて計算する場合についてスパース行列に対する確率的考察をもとにして計算過程における非零要素数の変化を定量的に求め、それをもとにして計算のアルゴリズムについて提案を行なっている。

筆者らはこれを独立にスパース行列の演算のアルゴリズムに興味を持ち、シミュレーションを行なっていたが椎野氏の結果と異ったデータが得られた。その相違点と相違が生じた原因について検討したのでここに報告する。

2. スパース行列パターンを用いたシミュレーションとその結果

われわれは 100×100 の行列を発生し対角要素を非零とし他の要素に対し乱数を用いて非零要素をランダムに分配し結果の行列をガウスの消去法を用いて計算を進めていく過程をシミュレートし非零要素数の変化のトレースを行なった。ただし計算の過程で非零要素

同志の引算によって差が零になることはないとは仮定した。

椎野氏の論文に用いられているものと同等の係数  $m$  を  $m=2$  とした場合の非零要素の計算過程における増

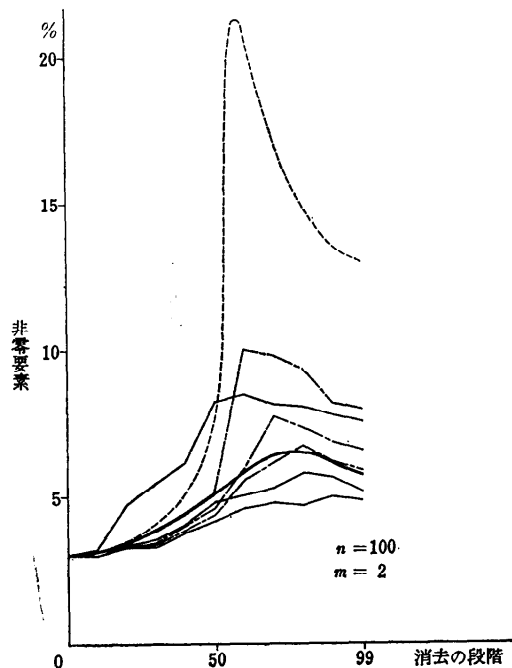


図 1 ガウス消去による非零要素の変化  
Fig. 1 Number of non-zero elements versus elimination step

\* Problems about the paper— "A Probabilistic Consideration of Sparse Matrix", by Yukio KANEDA (Computer Division, Electrotechnical Laboratory)

\*\* 電子技術総合研究所電子計算機部

減を図1に示す。ここで細実線は行列全体に対してランダムに非零要素を分配した場合であり、一点鎖線は各行に一定の個数ずつランダムに分配した場合(各行の非零要素数は一定)である。

いずれも3つの曲線が得られているが、これらは何回かのシミュレーション結果の内、最終結果の最小のもの、最大のもの、ほぼ平均のもの例である。

点線は椎野氏の結果である。

### 3. 椎野氏の解析法の問題点

椎野氏の解析では第k回目のガウス消去より増加する非零要素数は論文中第(12)式で与えられ、消去の結果できた部分行列の非対角要素中の非零要素の確率 $P^{(k)}$ は(13)式

$$P^{(k)} = P^{(k-1)} + \{P^{(k-1)}\}^2 \{1 - P^{(k-1)}\}$$

で与えられるとしている。

まず問題となるのは(k-1)回目の消去の結果できた部分行列 $X^{*(k)}$ の非対角要素が非零である確率を(13)式で与えていることで、各回の消去で各行の非零要素が一樣に増加するとしている。

第72回目の消去後のXの部分行列

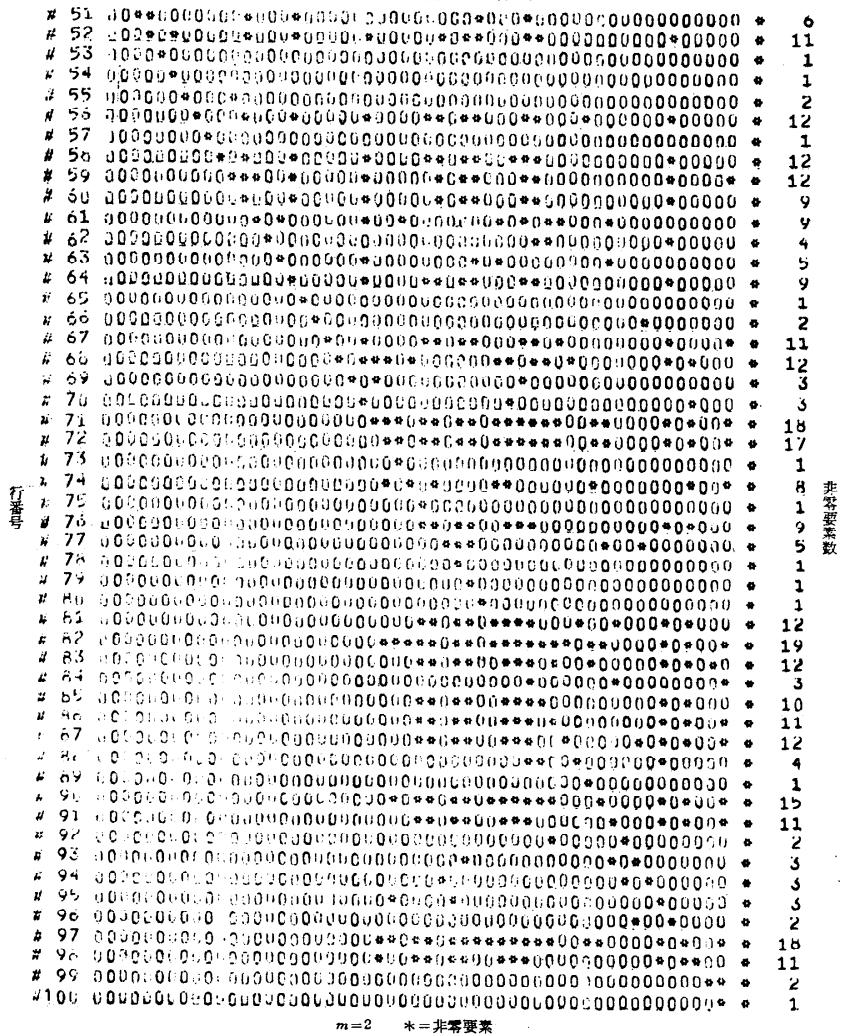


図2 消去過程での非零要素のパターン  
Fig. 2 An example of Matrix pattern

しかし  $k$  回目の消去で非零要素の増加する行はピボットに選ばれた列の要素が非零である行に限られており、 $X^*(k)$  の行ごとの非零要素数に偏りが生じてくる。

もう一つの問題点はこの解析では非対角要素中の非零要素の位置関係は消去の過程で増加した非零要素を含んでも全くランダムに配置されているとしている。

しかし消去の過程で生じる非零要素の位置には大きな相互関係があり、消去の過程が進むにつれ、非零要素の位置関係は独立と見せなくなる。(図 2)

これら 2 つの要因はいずれも消去の過程における非零要素の増加をおさえる働きをするが、椎野氏の解析ではこれらの現象を考慮に入れていないので大きな差が生じてきたと考えられる。

#### 4. 非零要素数の変化の確率的考察

ガウスの消去法で消去を進めていく過程で、行  $K$  が  $l$  行  $R_1, R_2, \dots, R_l (l < k)$  の消去操作を受けている状態に着目する。

この場合行  $R_i$  は行  $R_j$  の消去操作を直接受け、行  $K$  は行  $R_i$  の直接消去操作を受けているとすると、行  $R_j$  の直接消去操作を行  $K$  は受けていなくても実効的には行  $R_j$  の消去操作を受けていると考える。

$X^{(0)}$  の要素  $x_{ij}^{(0)} (i=1, \dots, k, j=1, \dots, k)$  からなる部分行列  $X_{kk}$  に着目する。この行列の非零要素を 1 とした行列を作ると、この行列は  $k$  個のノードからなる有向グラフの接続行列 (adjacency matrix) に対応させることができ、問題を有向グラフに対応させて考察することができる。

ガウス消去の過程で行  $K$  が行  $R_i$  の消去操作を受ける対象となるための必要十分条件は対応する有向グラフでノード  $K$  からノード  $R_i$  へ有向弧をたどった径路が存在すること、すなわち  $K$  から  $R_i$  に到達可能 (reachable) であることである。

したがって行  $K$  が  $l$  行  $R_1, R_2, \dots, R_l$  の消去操作を受けている確率は対応する有向グラフにおいてノード  $K$  からノード  $R_1, R_2, \dots, R_l$  に対して到達可能である確率を計算すればよい。

以後、行列  $X^{(0)}$  の非対角要素が非零である確率はすべて等しく  $P$  であるとして解析を進める。

$P(k)$  を第  $k-1$  回の消去操作後の行  $K$  の要素  $x_{k, l+1} \sim x_{k, n}$  中の非零要素の確率であるとする、第  $k-1$  回の消去操作後の行列  $X$  の非零要素数  $N$  は

$$N = n + \sum_{i=1}^k P(i)(n-i) + P(k)(n-k)(n-k-1) \quad (1)$$

となる。(  $n$  は行数)

したがって  $P(k)$  を求めることができれば  $N$  を求めることができる。

行  $K$  が  $l$  行の消去操作を受けているとすると、

$$P(k) = \{1 - (1-P)^{l+1}\} \quad (2)$$

となる。

行  $K$  が  $l$  行の消去操作を受けている確率を  $a_{li}$  とすると  $P(k)$  は

$$P(k) = \sum_{l=0}^{k-1} a_{li} \{1 - (1-P)^{l+1}\} \quad (3)$$

となる。

$P(k)$  を求めるため対応する有向グラフにおいて、ノード  $K$  から  $k_1$  個のノードに有向弧が存在し、 $k_2$  個 ( $=l-k_1$ ) のノードには直接有向弧はないが到達可能であるという状態が発生する確率を求める。

行列  $X_{kk}$  の第  $k$  行の要素中に  $k_1$  個の非零要素が存在する確率を  $P_k(k_1)$  とすると

$$P_k(k_1) = \binom{k-1}{k_1} P^{k_1} (1-P)^{k-(k_1+1)} \quad (4)$$

となる。(  $x_{kk}$  は常に非零であるが、この確率計算では  $x_{kk}$  要素は除いている。)

次にノード  $K$  から  $k-1-(k_1+k_2)$  個のノードへ到達不能である確率は、 $(k_1+k_2)$  個のノードから、 $k-1-(k_1+k_2)$  個のノードへの有向弧が存在しない確率と  $k-1-k_1$  個のノードから  $k_2$  個のノードを取出せる組み合わせ数との積であるから、

$$\binom{k-1-k_1}{k_2} (1-P)^{(k-1-(k_1+k_2)) \cdot (k_1+k_2)} \quad (5)$$

となる。

$k_1$  個のノードから  $k_2$  個のノードへの径路が存在する確率を求めるため次のように確率関数を定義する。

$k_1$  個のノードから  $k_3$  個のノードへの径路があり、 $k_2-k_3$  個のノードへは径路がない確率を  $P(k_2, k_3, k_1)$  とする。

$k_1$  個のノードから  $k_2$  個のノードへの径路が存在する確率は  $P(k_2, k_2, k_1)$  となり

$$P(k_2, k_2, k_1) = 1 - \sum_{k_3=0}^{k_2-1} P(k_2, k_3, k_1) \quad (6)$$

となる。

ここで  $P(k_2, k_3, k_1)$  は

$$\begin{aligned}
 & P(k_2, k_3, k_1) \\
 &= \binom{k_2}{k_3} \{P(k_3, k_3, k_1) \\
 &\quad \times P(k_2 - k_3, 0, k_1)(1-P)^{k_3(k_2 - k_3)}\} \quad (7)
 \end{aligned}$$

となる。

また

$$P(k_2, 0, k_1) = (1-P)^{k_1 k_2} \quad (8)$$

であるから、

(6) 式, (8) 式を用いて (7) 式が計算でき, (7) 式を (6) 式に代入することにより, (6) 式は計算される。以上の諸式より  $P(k)$  を求めると、

$$\begin{aligned}
 P(k) &= \sum_{k_1=0}^{k-1} \binom{k-1}{k_1} P^{k_1} (1-P)^{k-(k_1+1)} \\
 &\quad \times \sum_{k_2=0}^{k-1-k_1} \binom{k-1-k_1}{k_2} (1-P)^{(k-1-(k_1+k_2))(k_1+k_2)} \\
 &\quad \times \left[ 1 - \sum_{k_3=0}^{k_2-1} \binom{k_2}{k_3} \right. \\
 &\quad \times \{P(k_3, k_3, k_1)(1-P)^{(k_1+k_3)(k_2-k_3)}\} \\
 &\quad \times \{1 - (1-P)^{k_1+k_2+1}\} \quad (9)
 \end{aligned}$$

となる。

(9) 式を (6) 式, (7) 式, (8) 式などを用いて計算し (1) 式に代入して求めた非零要素数の変化の過程を図 1 の太実線で示す。

この結果はシミュレーションの結果とよく一致している。

## 5. 結論

椎野氏の結果では急激に非零要素が増加するという現象が見られるが、シミュレーション結果や、第 4 節で述べた解析法による結果では、非零要素数の増加の割合はゆるやかで、特に初期状態において非零要素の少ない行列では椎野氏の結果との差は大きくなる。

したがって与えられた行列の演算過程における最大非零要素数の予測、演算処理量の予測に椎野氏の結果をそのまま用いるのは不適當で本論文で示した諸式を用いるのが適當と考えられる。

## 謝辞

本報告についての検討に加わっていただいた古川康一、有沢誠の両氏に深謝します。

## 参考文献

- 1) 椎野 努：スペース行列の確率的考察，情報処理，Vol. 14, No. 9, pp. 677~683 (1973).  
(昭和 48 年 11 月 20 日受付)  
(昭和 49 年 1 月 14 日再受付)