

スパース行列の確率的考察*

椎野 努**

Abstract

Most recent papers on sparse matrix techniques are written to describe large problem capability, but usually the illustrations given are for particular small problems.

In this papers, a probabilistic approach is used to study large scale sparse matrices of general use.

Analytic expressions for the number of non-zero elements on each step of elimination, the maximum number of fill-ins, the effect of distribution of non-zero elements on elimination process, and efficiency of sparse matrix techniques are described.

1. まえがき

スパース行列を計算する場合、いかに演算回数を少くし、記憶容量を小さく保つかが重要な問題となる。初期行列がたとえ多くの零要素を含んでいたとしても、演算順序を適当に選ばなければ演算の過程において非零要素が増大し、結局スパース性を活用できない結果になることから、演算の順序づけの手法がこれまで種々報告されている¹⁻⁵⁾。

このうち最も簡単な方法は n 行 n 列の初期行列を $X^{(0)}$ 、その行列の第 i_j 行の非零要素の数を $N_{i_j}^{(0)}$ としたとき

$$N_{i_1}^{(0)} < N_{i_2}^{(0)} < N_{i_3}^{(0)} \dots < N_{i_n}^{(0)}$$

ならば、ピボット順序を $i_1, i_2, i_3, \dots, i_n$ とする方法である。これは最初に行の入れかえ操作を行なうのみで、プログラムも簡単ですむが、何も行なわない場合にくらべて著しい改善が得られる。

さらに、スパース性をより有効に利用する手法として

- (i) P 回目の操作の結果できた行列を $X^{(P)}$ とし、その各行の非零要素の数を $N_k^{(P)}$ としたとき、未消去の行の中で、 $N_k^{(P)}$ が最小である行を $(P+1)$ 回目のピボットに選択する。
- (ii) $X^{(P)}$ から $X^{(P+1)}$ に至る過程で

$$M^{(P+1)} = \sum_{k=1}^n N_k^{(P+1)} \quad (1)$$

が最小となる行、すなわちその行をピボットとしたときに非零要素の増加が最小となる行を $(P+1)$ 回目のピボットに選択する。

- (iii) (ii) で $M^{(P+1)}$ を最小にする行が複数個あったとき、2段階後の非零要素の増加まで考慮し、増加を最小にする行をピボットに選択する。

などの方法が報告されている。しかし、これらの手法は行列の形態、サイズによっては有効な結果を与える場合があるが、一般に行列のサイズが大きくなると順序づけそのものかなりの処理を要することになり、ピボット選択によって得られた行列演算の減少を相殺ないしは上まわる可能性が強い。またスパース行列の記憶構造との関係からプログラムも複雑になり、費やした労力にくらべて得られる効果は薄く、場合によっては逆効果をまねく可能性もある。

スパース行列法の考察においては、これまで定量的に効果が論じられた例は少なく、特殊な例題によって効果を示したものが多かった。

本稿では、連立1次方程式をガウス消去法で計算する場合について、一般的なスパース行列の確率的考察から、演算過程における非零要素の変化の様子、非零要素の分布が演算過程におよぼす影響等を定量的に求めるとともに、非零要素数の最大値の予測法等についても述べた。また、演算手法としては最初の順序づけのみで途中のピボット選択を行なわない方法でも十分有効な結果が得られることを示し、大規模行列を扱う

* A Probabilistic Consideration of Sparse Matrix, by Tsutomu SHIINO (Software Systems Division, Oki Electric Industry Co., Ltd.)

** 沖電気工業株式会社ソフトウェア事業部

もので、汎用性を考慮すると他の複雑な選択をするよりもむしろこの方法を用いた方が全体の性能としてはすぐれたものになりうることを示した。さらに、初期行列の行のみでなく列の入れかえを行なうことにより著しい効果の改善がみられることを示すとともに初期行列としての非零要素の最適分布についても述べた。

2. スパース行列の確率的取り扱い

n 行 n 列のスパースな係数行列 X をもつ連立1次方程式を、ガウス消去法で計算する場合を考える。

消去の行なわれていない初期行列を $X^{(0)}$ とし、その i 行 j 列の要素を $x_{ij}^{(0)}$ とする。 $x_{ij}^{(0)}$ が零でない確率を $P_{ij}^{(0)}$ で表わすと、 $X^{(0)}$ の非零要素の数(期待値)は次式で与えられる。

$$N^{(0)} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n P_{ij}^{(0)} \quad (2)$$

第1行をピボット行として消去したときの非零要素の増加を考える。ただし $x_{11}^{(0)} \neq 0$ とする。

第 i 行の非零要素が増加するのは $x_{i1} \neq 0$ で、しかも $x_{i1} \neq 0, x_{ij} = 0$ となるような j が存在するときであるから、第 i 行の非零要素の増加する量は

$$P_{i1}^{(0)} \left\{ \sum_{j=2}^n P_{1j}^{(0)} (1 - P_{ij}^{(0)}) \right\} \quad (3)$$

で表わされる。ただし $1 - P_{ij}$ は $x_{ij} = 0$ である確率である。

よって行列全体で増加する非零要素の量は

$$C_1^{(1)} = \sum_{i=2}^n P_{i1}^{(0)} \left\{ \sum_{j=2}^n P_{1j}^{(0)} (1 - P_{ij}^{(0)}) \right\} \quad (4)$$

となる。一方、消去によって減少する第1列の非零要素の量は

$$C_D = \sum_{i=2}^n P_{i1}^{(0)} \quad (5)$$

であるから、第1回目の消去により増加する非零要素数は

$$C^{(1)} = C_1^{(1)} - C_D^{(1)} = \sum_{j=2}^n P_{1j}^{(0)} \left\{ \sum_{i=2}^n P_{ij}^{(0)} (1 - P_{ij}^{(0)}) - 1 \right\} \quad (6)$$

で与えられる。

いま、消去の結果できた行列 $X^{(1)}$ の第1行と第1列を除いた部分行列を $X^{*(1)}$ とすると、 $X^{*(1)}$ の要素 $x_{ij}^{(1)} (i, j = 2, \dots, n)$ の零でない確率は次式で与えられる。

$$P_{ij}^{(1)} = P_{ij}^{(0)} + P_{i1}^{(0)} \times P_{1j}^{(0)} \times (1 - P_{ij}^{(0)}) \quad (7)$$

一般に第 k 回目の消去により増加する非零要素数は

$$C^{(k)} = \sum_{i=k+1}^n P_{ik}^{(k-1)} \times \left\{ \sum_{j=k+1}^n P_{kj}^{(k-1)} (1 - P_{ij}^{(k-1)}) - 1 \right\} \quad (8)$$

で与えられ、部分行列 $X^{*(k)}$ の要素 $x_{ij}^{(k)} (i, j = k+1, k+2, \dots, n)$ の零でない確率は

$$P_{ij}^{(k)} = P_{ij}^{(k-1)} + P_{ik}^{(k-1)} \times P_{kj}^{(k-1)} \times (1 - P_{ij}^{(k-1)}) \quad (9)$$

で与えられる。

また、行列 $X^{(k)}$ の非零要素の数は

$$N^{(k)} = N^{(k-1)} + C^{(k)} \quad (10)$$

と表わすことができる。ただし $k=1, 2, \dots, n$ である。

図1に第 $(k-1)$ 回目の消去を終り、 k 回目の消去を行なう前の行列の状態を示した。

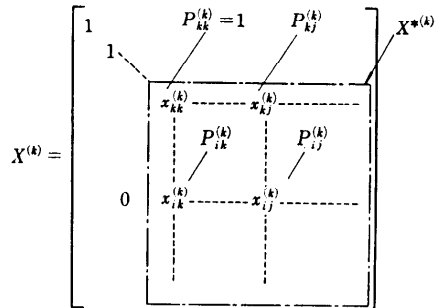


図1 第 $(k-1)$ 回目のガウス消去を終ったときの行列

Fig. 1 The matrix completed $(k-1)$ th step of Gaussian elimination.

3. 一定確率でランダムに非零要素が分布する場合

一般の平均的な行列として一定確率でランダムに非零要素が分布している行列を考える。ただし、演算の都合上対角要素はかならず非零でなければならないので $P_{ii}^{(0)} = 1 (i = 1, 2, \dots, n)$ とする。

初期行列 $X^{(0)}$ の非零要素の数は次式で与えられる。

$$N^{(0)} = n + n(n-1)P^{(0)} \quad (11)$$

ただし $P^{(0)}$ は対角要素以外の要素が非零である確率である。式(11)の第1項は対角要素の数、第2項はそれ以外の非零要素の数である。

この行列で、前節と同様のガウス消去法を行なう場合を考えると、第 k 回目の消去により増加する非零要素数は、

$$C^{(k)} = (n-k)P^{(k-1)} \times \{(n-k-1)P^{(k-1)} \times (1-P^{(k-1)}) - 1\} \quad (12)$$

で与えられる。ただし $P^{(k-1)}$ は第 $(k-1)$ 回目の消去の結果できた部分行列 $X^{*(k)}$ の対角要素以外の非零確率である。 $(n-k-1)$ は、対角要素の非零確率が 1 であるために、 $X^{*(k)}$ の $(n-k)$ 列中、非零要素増加の対象となるのが $(n-k-1)$ 列となるためである。

また $X^{*(k)}$ の対角要素以外の要素の非零確率 $P^{(k)}$ は次式で与えられる。

$$P^{(k)} = P^{(k-1)} + \{P^{(k-1)}\}^2 \{1 - P^{(k-1)}\} \quad (13)$$

非零要素の総数は前節と同様次式で与えられる。

$$N^{(k)} = N^{(k-1)} + C^{(k)} \quad (14)$$

式 (12), (13), (14) をもとに、 $n=11$, $n=101$, $n=1001$ について、対角要素以外一定確率でランダムに非零要素が存在する場合の $N^{(k)}$ および $P^{(k)}$ の値を計算した結果を図 2~4 に示す。図中 m は各行あたりの

対角要素以外の非零要素の個数で、 $P^{(0)} = m/(n-1)$ である。ただし、対角要素は非零であり、各行の非零要素数は $m+1$ である。

これらの図から非零要素数が最大となるのは $P^{(k)} = 1$ となる近傍であり、その値を $N_{\max}^{(k)}$ とすると、

$$N_{\max}^{(k)} = (n-k)^2 \quad (15)$$

であることがわかる。

それ以後の部分行列 $X^{*(k)}$ は全要素が非零となり、もはやスパース性の活用は考えられない。 $n=1001$ の場合には非零要素の割合が 0.5% ($m=5$) であっても $k=263$ で早くも $P^{(k)} = 1$ に達し、それ以後は通常の行列演算を余儀なくされる。また非零要素数の最大値も行列要素全体の約 55% に達し、スパース行列法の効果はかなりうすいものとなる。

式 (13) から $P^{(0)}$ が与えられれば $P^{(k)} = 1$ となる k を求めることができる。その結果を図 5 に示す。

この図と式 (15) を用いると、初期行列の要素の非

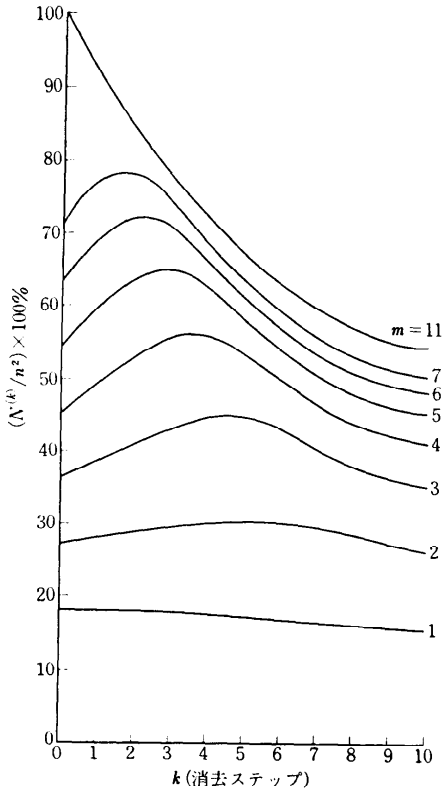


図 2 ガウス消去による非零要素の変化 ($n=11$)
Fig. 2 Number of non-zero elements versus elimination step ($n=11$).

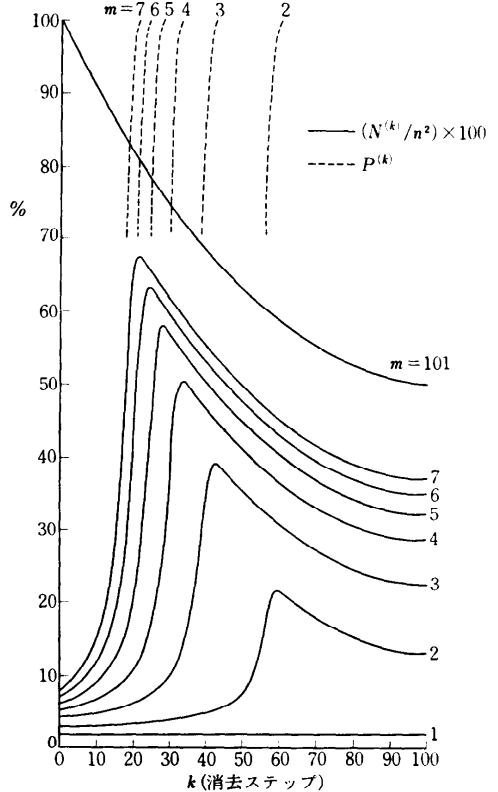


図 3 ガウス消去による非零要素の変化 ($n=101$)
Fig. 3 Number of non-zero elements versus elimination step ($n=101$).

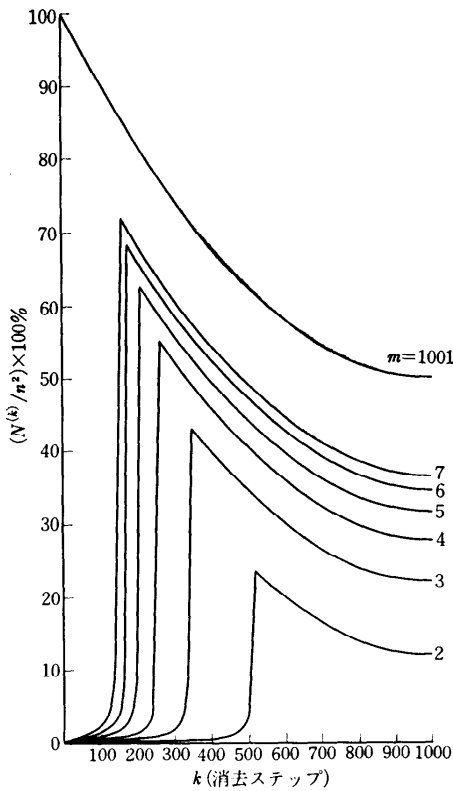


図4 ガウス消去による非零要素の変化 (n=1001)
Fig. 4 Number of non-zero elements versus elimination step (n=1001).

零確率 $P^{(0)}$ から、およその最大非零要素数を予測することができる。

4. 行方向に一定の確率、列方向に分布をもった確率で非零要素が存在する場合

前節ではランダムに非零要素が存在し、演算順序の入れかえによる効果のない行列について考察した。本節では行方向には一定の確率であるが、列方向に分布をもった確率で非零要素が存在する場合を考える。

このような場合には、ピボットとなる行を選択することによって非零要素の増加を著しく少なくすることができる。

初期行列 $X^{(0)}$ の第 i 行の対角要素以外の要素が非零である確率を $P_i^{(0)}$ 、対角要素の非零確率 $P_{ii}^{(0)}=1$ とする。この行列の非零要素の数は次式で与えられる。

$$N^{(0)} = n + \sum_{i=1}^n (n-1)P_i^{(0)} \quad (16)$$

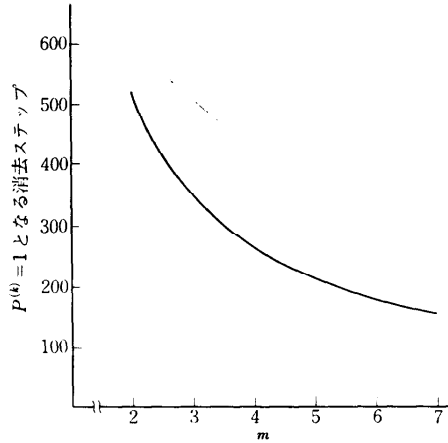


図5 初期行列における各行あたりの非零要素数 m 対 $P^{(k)}=1$ となる消去ステップ (n=1001)
Fig. 5 m (number of non-zero elements of each row in the initial matrix) versus elimination step at which $P^{(k)}$ becomes 1. (n=1001)

ガウス消去法によって第 k 回目の消去を行なったときの行列全体の非零要素数は、

$$N^{(k)} = N^{(k-1)} + \sum_{i=k+1}^n P_i^{(k-1)} \times \{(n-k-1)P_k^{(k-1)}(1-P_i^{(k-1)})-1\} \quad (17)$$

となる。部分行列 $X^{*(k)}$ の第 i 行の対角要素以外の要素が零でない確率は

$$P_i^{(k)} = P_i^{(k-1)} + P_k^{(k-1)} \times P_i^{(k-1)} \times \{1 - P_i^{(k-1)}\} \quad (18)$$

で与えられる。但し $i=k+1, k+2, \dots, n$ 。 $P_i^{(k-1)}$ は部分行列 $X^{*(k-1)}$ の第 i 行の要素の非零確率である。

いま、 $n=1001$ 、 $N^{(0)}=5005$ の行列について、3種類の列方向の分布を考え、それぞれ $N^{(k)}$ を計算した結果を図6に示す。

図の (a) は行列全体 (対角要素は除く) に一定確率 $P^{(0)}=4/1000$ で非零要素が分布した場合である。

(b) は次のような分布をもった行列の場合である。

$P_{i_1}^{(0)}=1/1000$	$i_1=1\sim 143$
$P_{i_2}^{(0)}=2/1000$	$i_2=144\sim 286$
$P_{i_3}^{(0)}=3/1000$	$i_3=287\sim 429$
$P_{i_4}^{(0)}=4/1000$	$i_4=430\sim 572$
$P_{i_5}^{(0)}=5/1000$	$i_5=573\sim 715$
$P_{i_6}^{(0)}=6/1000$	$i_6=716\sim 858$
$P_{i_7}^{(0)}=7/1000$	$i_7=859\sim 1001$

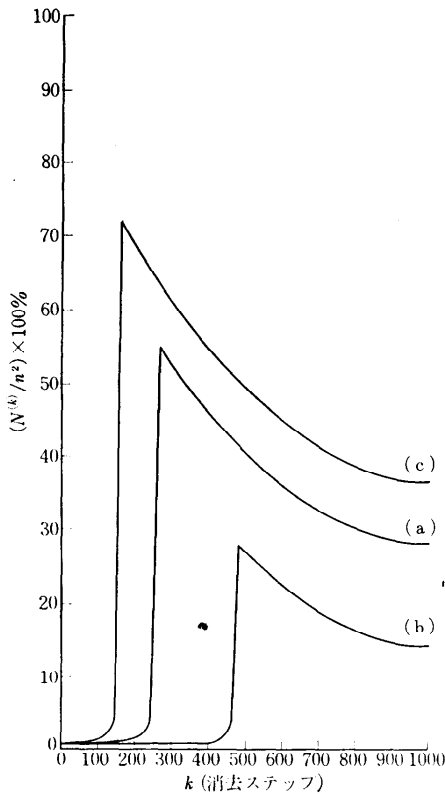


図 6 初期行列の非零要素分布が演算過程におよぼす影響

Fig. 6 Effect of the distribution of non-zero elements in the initial matrix on elimination process.

(c) は (b) の $i_1 \sim i_7$ を全く逆にした分布をもつ場合である。

(b) と (c) を比較すると、全く同じ内容の行列でありながら行の入れかえ、すなわち演算順序を適当に選ぶことにより約 1/2.5 の記憶容量ですむことがわかる。また、演算回数が非零要素の数に比例するとすれば、その比は図の曲線の積分値の比となり約 1/5 となる。

したがって非零要素の分布が一律でない一般の行列では、(b) のように非零要素数の少ない行から順に並べかえることにより、著しい効果を期待することができる。

式 (18) から明らかなように部分行列 $X^{*(k)}$ の要素の非零確率 $P_j^{(k)}$ は第 $(k-1)$ 回目のピボット行の非零確率 $P_k^{(k-1)}$ に依存するため、1 行でも非零

確率の高い行が途中に存在すると、それ以後の各行の要素の非零確率はすべて大きくなり、スパース性の活用は阻害される。

5. 列方向に一定の確率、行方向に分布をもった確率で非零要素が存在する場合

行方向に対する分布の影響をみるために、列方向に一定確率、行方向に分布をもった確率で非零要素が存在する場合を考える。ただし対角要素は非零であるとする。

第 j 列の対角要素以外の要素の非零確率を $P_j^{(0)}$ とすると、初期行列の非零要素の数は

$$N^{(0)} = n + \sum_{j=1}^n (n-1)P_j^{(0)} \tag{19}$$

第 k 回目の消去を行なったときの行列全体の非零要素数は

$$N^{(k)} = N^{(k-1)} + (n-k-1)P_k^{(k-1)} \times \left\{ \sum_{j=k+1}^n P_j^{(k-1)}(1-P_j^{(k-1)}) - 1 \right\} \tag{20}$$

で与えられる。ただし $P_j^{(k)}$ は $X^{*(k)}$ の第 j 列の要素の非零確率である。

この式は次のように変形することにより式 (17) と全く一致することがわかる。

$$N^{(k)} = N^{(k-1)} + (n-k-1) \times \sum_{j=k+1}^n \{P_k^{(k-1)}P_j^{(k-1)}(1-P_j^{(k-1)}) - 1\} \tag{21}$$

また、 j 列の要素の非零確率 $P_j^{(k)}$ は次式となる。

$$P_j^{(k)} = P_j^{(k-1)} + P_k^{(k-1)}P_j^{(k-1)}\{1-P_j^{(k-1)}\} \tag{22}$$

これも式 (18) と同じ式である。

すなわち、行方向に対する非零要素の分布も、列方向に対する非零要素の分布も、行列演算に対しては全く同等の影響をもっている。したがって、4 節で述べたような、行の入れかえによって得られる効果が、列を入れかえることによっても同様に得られることがわかる。

6. 初期行列最適非零要素分布と最大記憶容量の予測

前節までに述べたごとく、スパース行列演算においては、初期行列の非零要素の分布が記憶容量、演算回数に大きく影響する。

与えられたスパース行列に対する最適な演算法と

は、最も長くスパースリティを保存する方法であるといえる。

汎用プログラムとして、要素間の相関を考慮に入れないことにすると、このような最適演算法を満足するには初期行列において次のような分布をとれば十分である。

すなわち、行に対しては上から下に非零確率の小さい順にならべ、列に対しては右から左に非零確率の小さい列からならべる。

十分大きな行列で、要素間に相関が存在しなければ途中のピボット選択は不要である。なぜなら、この場合には初期行列を上述のごとく並べることにより、演算過程においても行、列に対する非零要素数の大小関係は保存され、常に最適順序で演算が行なわれるからである。

また、ある程度相関がある場合は途中のピボット選択を行なって相関を利用することにより非零要素の増加を少なくすることができるが、一般には相関をもつ行、列はだいたい同程度の非零要素数を有する行、列間が多く、前述のような初期行列のならべかえを行なった場合も相関関係は自然に利用される場合が多い。

また、大規模行列においては第1節で述べた種々のピボット選択法はかならずしも最適順序を与える保証はなく、一般的には大きな効果を期待することができず、場合によってはかえって逆効果を生む可能性もある。

初期行列の行、列のならべかえは、処理も行列演算の最初に行なうだけでよくプログラムも簡単で高い効果が得られる所から大規模汎用プログラムに適した方法である。

次に、スパース行列を計算する場合、計算途中の非零要素数の増大を考えて記憶容量をどの程度にとるかを考える。

全体としての非零要素数が与えられたとき、最悪の分布は行列全体に一律に非零要素が存在する状態である。なぜなら少しでも各行、各列間に一律でない分布があれば、前述の手法によって改善できるからである。したがって、プログラムとして最も安全な設計法は非零要素の一律分布を仮定することである。この場合の非零要素数の最大値の求め方は3節に述べたとおりである。

初期行列において非零確率の小さい順に行をならべかえたとき、ある行 l の要素の非零確率が P であるとすると、式 (11)~(14) において $P^{(0)}=P$ において得

られる最大非零要素数 $N_{\max}^{(k)}$ を実現する k に対して $k \leq l$ であれば、図 2~4 より $N_{\max}^{(k)} < N_{\max}^{(l)}$ である。ただし $N_{\max}^{(k)}$ は非零要素が一律分布した場合の最大非零要素数であり、 N_{\max} は与えられた行列の最大非零要素数である。

したがって与えられた行列の最大非零要素数の予測は、行のならべかえを行なった後、各行の非零要素密度と、図 2~4 の $P^{(0)}$ とを比較することにより N_{\max} の限界を予測することができる。

列方向のならべかえを行なえばさらに N_{\max} は小さくすることができる。

7. スパース行列法の有効性

与えられた行列をスパース行列法で解くのがよいか、通常の行列演算法で解くのがよいかは常に問題となる所である。ここでは記憶容量、処理時間の面からスパース行列法の有効な範囲を考察する。

スパース行列を記憶する際、要素の位置を行と列のポインタで示すとすれば、ポインタには行数+要素数の記憶容量を要する。したがって、スパース行列を記憶するのに要する記憶容量は全体で

$$n+2N$$

となる。ただし N は非零要素数。

記憶要量の面からみればスパース行列法によることが有効なのは

$$n^2 > n+2N_{\max}$$

の場合である。 N_{\max} は最大非零要素数。

たとえば $n=1001$ の行列では非零要素が一律分布の場合、図 4 より $P^{(0)} \cong 0.36\%$ 以下でないとスパース行列法が有効でない事になる。非零要素が一律分布でなくかたよりのもった場合はこれよりも非零要素の多い行列まで有効となる。

次に処理時間を考えると、ポインタの処理と要素間の演算の時間比を α とすれば、処理時間が非零要素数に比例するとして、スパース行列法を使用した場合としない場合の比は、図 4 の曲線の積分值から

$$A(1+\alpha)/A_0$$

で与えられる。ただし A はスパース行列法を使用したものの図 4 の積分值、 A_0 は使用しないとき (非零確率 100%) の曲線の積分值である。

いま、仮に $\alpha=1$ とすれば

$$2A/A_0 < 1$$

の範囲でスパース行列法が有効である。たとえば $n=1001$ で非零要素が一律分布の場合を考えると、図 4

より $P^{(0)} \cong 0.5\%$ までスパース行列を使用する方が有利であるといえることができる。

8. むすび

零要素の多い行列を演算する場合スパース行列法が使用され、その演算過程における非零要素の増加を防ぐための種々の方法が報告されている。しかし、非零要素の増大をおそれるあまり複雑なアルゴリズムによって最適順序づけを行っても一般にはそれ程の効果は得られず、行列の規模の増大にともなって順序づけに要する処理が無視できなくなる場合もある。

本稿ではスパース行列の確率的な考察から、演算過程の非零要素の変化を求め、大形スパース行列用の汎用プログラム等においては、順序づけとしては初期行列の行、列の入れかえのみで十分有効な結果が得られることを示した。また与られた行列の演算過程における最大非零要素の予測、発生する全非零要素数、演算処理量の予測法、さらにはスパース行列法を用いる場合の有効性等についても述べた。

終始御指導賜わった当社ソフトウェア事業部システ

ム第2部杉浦宣紀部長、山本正隆次長ならびに部員諸氏に深謝する。

参考文献

- 1) R. D. Berry: An optimal ordering of electronic circuit equations for a sparse matrix solution, IEEE Trans., CT-18, 1971. 01.
- 2) W. F. Tinney and J. W. Walker: Direct solutions of sparse network equations by optimally ordered triangular factorization, Proc. IEEE, 55, 1967.
- 3) G. D. Hachtel, et al.: The sparse tableau approach to network analysis and design, IEEE Trans., CT-18, 1971. 01.
- 4) 坂元, 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, 13, 1972. 03.
- 5) H. Y. Hsieh and M. S. Ghauri: A probabilistic approach to optimal pivoting and prediction of fill-in for random sparse matrices, IEEE Trans., CT-19, 1972. 07.

(昭和48年5月24日受付)

(昭和48年7月20日再受付)