スパース構造の連立一次方程式に対する Householder 法†

平 野 泰 彦††

連立一次方程式の係数行列が正定値対称行列でないときは，ユニタリ変換による解法を用いれば安定である．これに属する Householder 法は Gauss 消去法に比し計算量は約2倍であるが，ピボッティングを要しないから電子計算機による計算時間はかえって有利である．そのとき，係数行列がスパース構造であると，上三角化の消去演算において，零要素ができるだけ非零値にならないように考慮して，零要素との乗算を省くと有利に計算できる．

そのためには，あらかじめ係数行列を行または列の入れかえによりできるだけ上三角化しておくとよいことを数値実験により確めた．この三角化の技法は対角要素が零値でもよいので，Gauss 消去法の三角化よりも簡単になる．以上は基本的考察であるが，実際に大形問題に適用して有利であると確信する．また，この方法は実係数に限らず，複素係数の連立一次方程式の解法にも利用することができる．

1. まえがき

連立一次方程式の係数行列が正定値対称行列からなるときには，非ユニタリ変換である Cholesky 法や修正 Cholesky 法が用いられる．行列の性質から安定であって，ピボッティングしなくてはよい．これに対し，正定値対称行列でない連立一次方程式では，ユニタリ変換による解法を用いれば安定である．これに属する Householder 法は Gauss 消去法に比し計算量は約2倍であるが，ピボッティングを要しないから電子計算機による計算時間はかえって有利である．

連立一次方程式の係数行列がスパース構造であるときは，上三角化の消去演算において，零要素ができるだけ非零値にならないように考慮して，零要素との乗算を省くと有利に計算できる．上記の事項を満足するように，Gauss 消去法ではいろいろと研究されているので，Householder 法について，その特徴を生かすという観点から考察した．

2. スパース構造に対応する Householder 法

Householder 法による連立一次方程式の解法は，与えられた係数行列を $A=A_1$ として，

$$A_{r+1}=P_rA_r \quad (r=1, \cdots, n-1) \tag{1}$$

を反復計算することにより上三角行列に消去される．ここに，行列 P_r は次式で表される．

$$P_r=I-\beta u_r u_r^T$$

$$u_r^T=(0, \cdots, 0, x_r, \cdots, x_k, x_{k+1}, \cdots, x_n) \tag{2}$$

したがって，スパース構造の連立一次方程式に Householder法を適用するには，消去演算する前に係数行列の非零要素をできるだけ上三角行列に近い形に三角化する有利と考えられる．

係数行列をあらかじめ三角化しておくと，消去演算において上三角行列内の零要素は非零値になる可能性が大きいが，下三角行列内の零要素は維持される．いま，係数行列の第 r 列の最後の非零要素が k 行であると，u_r ベクトルの x_{k+1} より x_n までのすべての要素は零になる．零要素との乗算は容易に省くことができ，式(1)の計算量は減少することになる．しかも，連立一次方程式の右辺の計算のために，積形式で u ベクトルの要素と保存しておく必要があり，その点でも数量が少なくて都合よい．計算量の目安として乗算量をとりあげてカウントしてみると，P_rA_r の全要素の乗算量は $2(n-r+1)^2$ であるが，零要素との乗算を除くと $2(n-r+1)(k-r)$ になる．したがって，乗算量は $2(n-r+1)(n-k)$ の減少ということになり，$r=1$ から $n-1$ までについてこれらを総計すれば，全乗算の減少量が求まる．

あらかじめ三角化した係数行列の各列の最後の非零要素の行番号を k とすると，スパース構造の連立一次方程式に対する Householder 法は次の計算手順になる．

(1) $s^2=\sum_{t=r}^{k} a^2_{tr}$ を計算する．

(2) $a_{rr}\geq 0$ なら $s=-\sqrt{s^2}$

$a_{rr}<0$ なら $s=\sqrt{s^2}$

† The Householder's Method on Sparse Matrices by YASUHIKO HIRANO (Yatusiro Technical College).

†† 八代工業高等専門学校

（3） $\beta=1/(s^2-sa_{rr})$ を計算する．

（4） $P_r=I-\beta u_r u_r^T$,

$u_r^T=(0,\cdots,0,a_{rr}-s,a_{r+1r},\cdots,a_{kr},0,\cdots,0)$

をAに掛ける．

以上を $r=1$ より $n-1$ まで繰返して係数行列Aを上三角化する．

（5） 右辺に P_r を $r=1$ より $n-1$ まで乗算する．

（6） 後退代入により解を求める．

この計算手順は項（1）と（4）が一般用と異なっている．

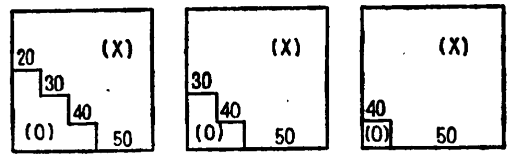
3. 数 値 実 験

実際のプログラミングでは， $P_rA_r\,(r=1,\cdots,n-1)$ の行列乗算を繰返すのでなく，列ごとに処理していくと大形行列の仮想メモリに対して都合よい．また，丸め誤差に対して部分倍精度演算を行うことができ，対角要素のけた落ちから悪条件に対する計算精度の劣化を容易に知ることもできる．

数値実験例として，**図1**に示す零要素が600個，300個および100個の場合の50元連立一次方程式をとりあげた．その解を一般用とスパース構造用の部分倍精度演算フォートラン・プログラムを用いて FACOM 230-28 により計算した．それらの計算時間を乗算量とならべて**表1**に示す．計算量の目安として消去演算の乗算量だけをカウントしたので，平方根の計算などが含まれておらず，実際の計算時間比とは多少の差異を生じた．スパース用プログラムの効果は，零要素が少ないときはほとんどなく，多くなるにしたがって大きくなることがわかる．

4. 三角化の技法

スパース係数行列を行，列の入れかえによりあらかじめできるだけ三角化する技法は，線形計画法などの大形問題において，Gauss 消去法の効率向上のために用いられている．そのとき対角要素が非零要素になるように工夫された，複雑ではあるが効率のよい新しい三角化技法が Rarick などによって提案された．しかし，Householder 法では対角要素は零要素でも差支えなく，したがって三角化の手順はかなり簡単になる．また，前者では非零要素を下三角化するのに対し，後者では上三角化する点も異なっている．



（a）零要素600個　（b）零要素300個　（c）零要素100個

図1 零要素をもったテスト行列

Fig. 1 Test matrices having zero elements.

行列Aの三角化は次のようなブロック行列を作成することになる．

$$A=\begin{bmatrix} S_{11} & A_{12} & A_{13} \\ 0 & A_{22} & A_{23} \\ 0 & 0 & S_{33} \end{bmatrix} \qquad (3)$$

ここに，S_{11} と S_{33} は上三角行列で，これらを除いた残りの行列A_{22}をできるだけ上三角行列に近づけるわけである．このために，各行各列の非零要素数のカウントを要し，行カウントを R_i，列カウントを C_j とする．

Householder 法のための三角化技法は次の三つの手順からなる．

（1） 非零要素数が1の列（列シングルトンという）qをみつける．対応する要素 a_{pq} があればこれを行列の主対角線上左上に置く．そのとき各列について第p行に非零要素をもつのがあれば，それらの列jの列カウント C_j から1を引き更新する．p行とq列は以後の考察の対象から除き，列シングルトンが存在しなくなるまでこれを繰返して S_{11} を求める．

（2） 非零要素数が1の行（行シングルトンという）hをみつける．対応する要素 a_{hq} を主対角線上の右下に置く．そのとき，各行について第q列に非零要素をもつものがあれば，それらの行iの行カウント R_i から1を引き更新する．h行とq列は以後の考察の対象から除き，行シングルトンが存在しなくなるまでこれを繰返して S_{33} を求める．

表1 両プログラムによる計算時間の比較

Table 1 Comparison of machine times using both programs.

	600 zero elements		300 zero elements		100 zero elements	
	machine time	number of multiplication	machine time	number of multiplication	machine time	number of multiplication
sparse program	18.7	39,250	27.1	60,350	33.4	76,750
general program	33.3	85,850	33.3	85,850	33.5	85,850
ratio	0.65	0.46	0.81	0.70	0.997	0.98

(3) 列カウント C_j が最小の列を探す．このような列が二つ以上あるときは列番号の若い v 列をとり，非零要素を行番号の若い順に次の列の新しい行番号から並べる（二つ以上の列が同一行に非零要素をもつものを選ぶと効率がよいが，手順が面倒になる.）．$C_j=0$ のときは次の列を確保するだけである．v 列に非零要素をもつすべての行について，それらの行上に非零要素をもつ列の列カウントを更新する．v 列および v 列に非零要素をもつ行をすべて以後の考察の対象から除き，これを繰返して A_{22} を求める．

以上の三角化技法を用いて 16 次の行列を三角化した一例を図 2 に示す．最初の 2 行 2 列が S_{11}，最後の 1 行 1 列が S_{33} で，残りが A_{22} に相当している．上三角行列からはみ出している列は次の 9 列である．

$r=3, 4, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14$

$k=4, 5, 9, 11, 13, 14, 14, 14, 15$

$k-r+1=2, 2, 2, 3, 4, 4, 3, 2, 2$

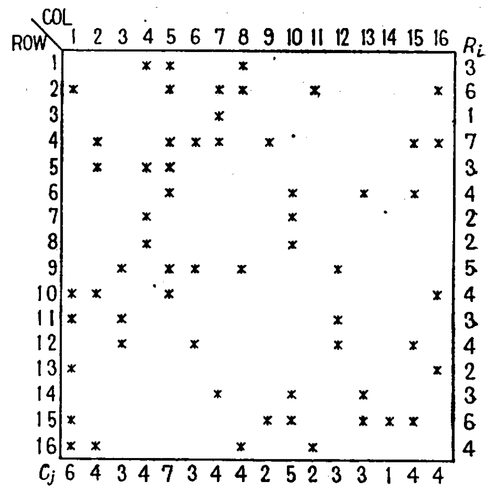
P_r は $(k-r+1)$ 次の行列とみなされ，比較的小さく最大 4 次である．$k=r$ のときに P_rA_r の計算を要しないことはいうまでもない．また，上三角部にかなりの零要素が含まれているから，その乗算を省くことも考えられる．

5. む す び

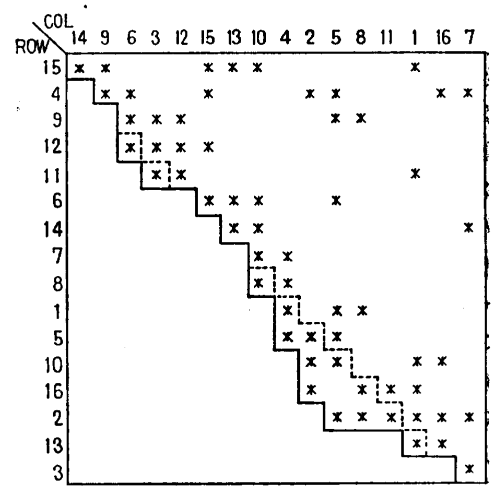
スパース構造の連立一次方程式に対し，あらかじめ係数行列を上三角化することにより Householder 法を用いて有利に計算する方法を述べた．以上は基本的考察であるが，大形問題に実際に適用しても有利であると確信する．また，この方法は実係数に限らず，複素係数の連立一次方程式の解法にも利用することができる．

終りに，係数行列がスパース構造であるなしにかかわらず，正定値対称行列でない連立一次方程式に対し，ユニタリ変換による解法が広く利用されることが望ましいと確信する．

謝辞 本研究に対し有益なご意見，ご援助を頂いた熊本大学工学部松山公一教授に深謝いたします．



（a） 並べ変える行列



（b） 並べ変えた行列

図 2 行と列の入れかえによる三角化の例

Fig. 2 Example of preliminary rearrangement of rows and columns.

参 考 文 献

1) 平野泰彦：ユニタリ変換による連立一次方程式の解法，情報処理，Vol. 18, No. 12, pp. 1244–1247 (1977).

2) Hellerman and D. Rarick: Reinversion with the Preassigned Pivot Procedure, Mathematical Programming, Vol. 1, pp. 195–216 (1971).

3) 小国 力：線形計画法における三角化法，情報処理研修センター．

（昭和 53 年 2 月 25 日受付）

（昭和 53 年 5 月 27 日採録）