I-58　連立一次方程式の解法へのグラフ理論の適用

京都大学　工学部　学生員　潤井　誠

京都大学　工学部　正員　白石成人

京都大学　工学部　正員　谷口健男

1．まえがき

構造解析において連立一次方程式の解法は重要なプロセスであり，今日までに電算機の特性にあった多くの手法が提案されているがその基本となるのがガウスの消去法である。このガウスの消去法は，連立一次方程式の係数行列を上三角行列に変換し，それに従って定数項を変換する前進消去と，その結果一意的に定まる後退代入からなっている。今変位法における連立一次方程式を考えるとその係数行列は対称かつ正定値の行列である。それを $A=[a_{ij}]$ と表わす。前進消去における k 列の $k+1$ 行目以下の消去にともなう a_{ij} の変換は次式となる。[1)]

$$\tilde{a}_{ij}=a_{ij}-\frac{a_{ik}\cdot a_{kj}}{a_{kk}}\qquad\begin{cases}i=k+1,\ k+2,\ \cdots\ n\\ j=i,\ i+1,\ \cdots\ n\end{cases}\qquad(1)$$

このようにして得られた上三角行列 $\hat{A}$ はグラフ的には有向グラフである。このことからガウスの消去法はグラフ的には無向グラフであった係数行列を一意的に方向づけを与えた有向グラフに等置換することを意味している。[2)]
式(1)から変換に必要な $[a_{ij}]$ は非零要素の envilope 内のものであることがわかる。そのことに注目した手法が Band Matrix 法であり，帯幅内零要素をさらに除く Profile 減少法である。そして帯幅内零要素が消去過程でも零要素であるものを除くのが Sparse Matrix 法である。[3)] 本研究はこの Sparse Matrix 法における非零化する零要素を最小化する方法（fill-in 最小化手法）を提案する。

2．fill-in 最小化に関する基礎的考察

構造物を表わすグラフ $G(n)$ が与えられ，かつ全ての節点が任意に $1\sim n$ とラベルされているものとする。
式(1)から $a_{ij}=0$ の要素の変換はグラフ的につぎのように表現できる。

$$\left.\begin{array}{lll}\text{if} & d(v_k,v_i)=d(v_k,v_j)=1, & \tilde{a}_{ij}\neq 0\\ \text{if} & d(v_k,v_i)>1 \text{ or } d(v_k,v_j)>1, & \tilde{a}_{ij}=0\end{array}\right\}\quad(2)$$

ここで $d(v_k,v_i)$ は節点 k (v_k) と v_i との距離を示し，$\tilde{a}_{ij}\neq 0$ は v_i と v_k に新たな辺の発生（fill-in）があったことを，そして $\tilde{a}_{ij}=0$ は fill-in がなかったことを示す。

[Th. 1]　前進消去過程の各段階はグラフ的には v_k を消去して，v_k に隣接していた節点より構成される subgraph を完全グラフにすることである。　（証明は略す）

[Th. 2]　ある節点とそれに隣接する節点と構成される subgraph が完全グラフならその節点を隣接している節点より先に消去し，つぎに隣接している節点を消去する方が fill-in 数は少ない。　（証明は略す）

[Th. 3]　v_i と v_j が隣接しているとき，もし v_i の次数が v_j の次数が大きいとき v_i を消去してつぎに v_j を消去する方がその逆の場合より fill-in 数は少ない。

[Pro. of Th. 3]　v_i と，それより距離 1 の節点より構成される subgraph を $\{G_s^i\}$，その節点数は n_i，line 数を γ_i とする。

$$\text{deg of } v_i=n_i-1$$

$$\text{deg of } v_j=n_j-1\qquad(\text{deg；次数})$$

イ）　v_i を先に消去しつぎに v_j を消去する場合

v_i の消去において発生する fill-in 数は [Th. 1] より (n_i-1) 点系の完全グラフを構成するに必要な line 数と現実に存在する line 数の差に等しく，これを incompleteness β_i と呼ぶ。$\{G_s^i\}$ の line の集合を $\mathcal{L}v_i$，そして節点の集合を $\mathcal{N}v_i$ とする。

$$\beta_i=\frac{1}{2}n_i(n_i-1)-\gamma_i$$

この消去で $v_i - v_j$ line は取り去られ $\{G_s^i - v_i\}$ の (n_i-1) 個の節点が $\{G_s^j\}$ に組み込まれる。故に

$\{\widetilde{G_s^j}\}$ の節点数 $\widetilde{n_j} = n_j + n_i - 1 - n_{ij}$ 　　　　$(n_{ij}\ ;\ \mathcal{N}v_i \cap \mathcal{N}v_j)$

$\{G_s^i - v_i\}$ に含まれる line 数 $= \frac{1}{2}(n_i-1)(n_i-2)$

$\therefore\ \widetilde{\gamma_j} = \gamma_j + \frac{1}{2}(n_i-1)(n_i-2) - m_{ij}$ 　　　　$(m_{ij}\ ;\ \mathcal{L}v_i \cap \mathcal{L}v_j)$

$$\beta_j = \frac{1}{2}(n_i+n_j-n_{ij}-1)(n_i+n_j-n_{ij}-2) - \gamma_j - \frac{1}{2}(n_i-1)(n_i-2) + m_{ij}$$

$v_i \to v_j$ の順に消去したときの incompleteness β_{ij} は

$$\beta_{ij} = \beta_i + \beta_j$$
$$= \frac{1}{2}n_i(n_i-1) - \gamma_i + \frac{1}{2}(n_i+n_j-n_{ij}-1)(n_i+n_j-n_{ij}-2) - \gamma_j - \frac{1}{2}(n_i-1)(n_i-2) + m_{ij}$$

ロ) v_j を先に消去しつぎに v_i を消去する場合

イ) と同様にして $v_j \to v_i$ の順で消去したときの incompleteness β_{ji} は

$$\beta_{ji} = \frac{1}{2}n_j(n_j-1) - \gamma_j + \frac{1}{2}(n_j+n_i-n_{ji}-1)(n_j+n_i-n_{ji}-2) - \gamma_i - \frac{1}{2}(n_j-1)(n_j-2) + m_{ji}$$

イ), ロ) で求めた β_{ij} と β_{ji} の差 $\delta\beta$ をとると

$$\delta\beta = \beta_{ij} - \beta_{ji} = n_i - n_j \qquad (3)$$

式(3)で $\delta\beta > 0$ ならら v_j を先につぎに v_i を消去する方が fill-in 数が小さいことを意味し，$\delta\beta < 0$ のときはその逆を意味している。つまり節点の次数の大小で消去の優先が判別できる。 （証明終り）

3. fill-in 最小化のアルゴリズム

[Th.2], [Th.3] を利用して fill-in 最小化手法の提案を行う。

Step. 1 ； 元のグラフに任意の節点番号をつける。

Step. 2 ； $\beta_i = 0$ の v_i の消去を行ない, v_i に隣接している節点の次数を 1 だけ減らす。v_i を list up する。

Step. 3 ； 次数最小の節点を消去する。

Step. 4 ； fill-in の発生している節点を list up する。

Step. 5 ； その節点の次数を fill-in が発生した数だけ増やす。

Step. 6 ； 消去した節点に隣接していた節点の次数を 1 だけ減らす。

この操作を行うことで節点の消去順序を決定する。

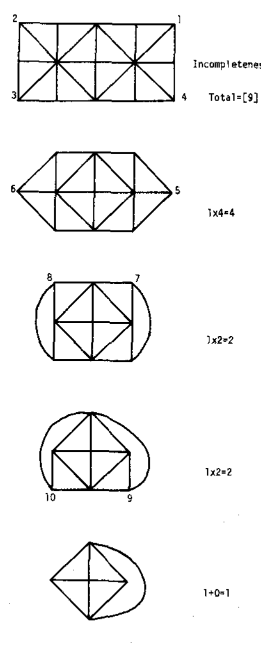

図 - 1

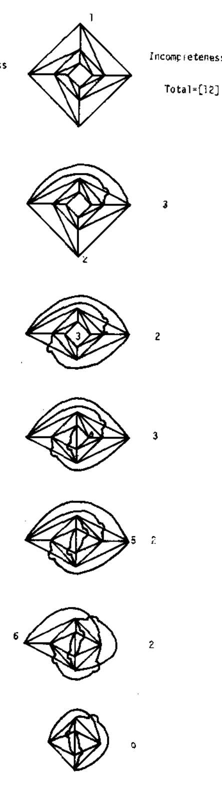

図 - 2

4. あとがき

ガウスの消去法における各段階とは v_k を消去してそれに隣接する節点を完全グラフにすることであることがわかった。v_i と v_j が隣接しているときはその次数の差が v_i, v_j の消去順序を決定し，その fill-in 数の差が次数の差として出てくるのがわかった。それを利用したアルゴリズムの提案ができた。これは従来同様局所的に fill-in 数を最小ならしめるものであるが，その基本は次数のみでありその自動化は非常に容易なものとなる。右図にこのアルゴリズムを用いた例題を示す。今後の課題として v_i, v_j の隣接関係の条件をはずしたグローバルな最適解について考察が必要であることがわかった。

5. 参考文献

1) 戸川隼人；マトリックスの数値計算；オーム社；昭和49年.

2) 白石・倉田；昭和52年度土木学会関西支部年講概要集 I-26.

3) Tinney, W.F. and Walker, J.W.; IEEE, 55, 1801-1809, 1967.