帯幅最小化問題に関する基礎的研究

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

行列の帯幅最小化問題は近年の電子計算機の発達による構造解析法の変化にともない重要視されるようになり、今日までに数多くの研究がなされてきたが、この分野の初期の研究者である G.G. Alway & D.W. Martin は「この問題が純粋なグラフの問題である」ことを指摘している[1]。すなわち系の最小帯幅値は系を表わすグラフの1つの特性と考えられるものである。よって、グラフ理論的にこの問題に取り組むのが正攻法と考えられるが、プログラミングの困難さ等の理由により通常は帯幅値に影響を及ぼすグラフ的概念の手法への導入が、この問題に対するアプローチの主流を占めており、少くとも計算機用アルゴリズムを目的として開発されてきた諸手法においてはいずれも常に最小値を導びくとはいえず、場合によっては非常に悪い結果しか求められない場合もある。（偶然に最小値に至る場合も、もちろんあるが、これは手法によるのではなく系のグラフの形状に依る。）

このように帯幅最小化問題は経験的にプログラム化が困難であることが知られてきたが、1972年開催された"Symposium on the Complexity of Computer Computation"において発表された R.M. Karp の研究[2]はグラフの問題を含む諸問題の計算可能性について言及し、従来より演算困難で有名であるクラシックな諸問題、例えば Hamilton Path の問題が計算機の特性に合致せず intractable problem であることを示し、それ以後のこの分野における一連の研究により、他の様々なグラフの問題が、上の問題と同じ class に属することが証明されてきた。1976年の Ch.H. Papadimitriou の研究によって帯幅最小化問題もこれらと同じ class に属することが証明されるに至った[3]。すなわち今日の計算機の機能をもってしては、この問題に対する正面よりのアプローチはほとんど不可能と云えるに至り、よって従来よりこの問題のプログラム化が困難であるといわれてきたことの裏付けがなされたことになる。

本研究においては、まずアルゴリズム論的立場よりみた帯幅最小化問題について概略説明を行い、ついで その結論を基にして 今後の帯幅最小化問題へのアプローチの仕方、帯幅最小化アルゴリズムと構造系との関連等について考察を加える。

2. NP-Complete Problem としての帯幅最小化問題

与えられた問題に対する演算の困難さを探るためには、現実の計算機の演算機能を単純化し、しかしながらその機能をそこなわないようなモデル機械の設定が必要である。このような機械として今日いくつか考案されているが、本節で用いようとするのは Deterministic Turing Machine (DTM) と Nondeterministic Turing Machine (NDTM) である[4]。これらは実際の計算機のプリミティブなもの と考えてよく、最大の違いはその演算速度にあると考えられよう。よって、演算の可能性を論ずる限りにおいて、これら機械を用いてもよい。DTM と NDTM との違いは、前者においては 全ての演算が シリーズに並ぶのに対し、後者においては 1つの演算につづく演算が複数個パラレルの形で存在しうるところにある。よって、NDTM で行いうる演算を DTM で行おうとすれば 非常に長大な時間を要すると考えられる。

通常の計算機において対象とする問題の困難さは、演算時間、容量というものでもって測られるが、一方 DTM, NDTM においては それらは それぞれ Time Complexity, Space Complexity というもので測られる[2,4]。Time Complexity とは DTM あるいは NDTM を用いて問題を解くのに必要な演算ステップ数といえるものである。一般に、ある問題の解を得るためのアルゴリズムが exponential time 要するとき、その問題は完全に intractable であると考えられ、もし polynomial time 内であれば 一応 tractable といわれる。

グラフに関連する問題は Language Recognition Problems であることはよく知られている。DTM あるいは NDTM を用いて 1つの language L が polynomial time 内に認識されうる場合、このような L の集合 $\mathcal{NP}$ を

P，NPと定義する。[2,4] この定義がそのままProblemsに対し適用されうることは明白である。DTMでもってNDTMの演算を行うことが少くとも可能であることを上に示したが，これはNDTMの全てのパラレルの演算をDTMでもって順次行いつくすことを意味し，よって もしLがNPに属するものであっても Lは DTMを用いることにより十分に認識されうることがわかる。逆に PがNPの内に包含されうるかどうか という問題は今のところ証明されてはいない。しかしながら，NPのそれと同等に困難なlanguage L_0の存在も知られており，$L_0 \in L$に対する deterministic polynomial-time bounded algorithm を見い出しえたならば NPに属するいかなるL^*に対しても deterministic polynomial-time bounded algorithm を見い出すことが可能であることが証明されており，これらlanguagesを NP-Complete (Nondeterministic Polynomial-time Complete)と定義する。[2,4] (NP-Completeとして有名なものに Clique， Hamilton Circuit等が挙げられよう。) 要約すれば，NP-Completeとは，現在の計算機では非常に取り扱いが困難な問題を示すといえる。

帯幅最小化の問題も，グラフの問題の1つであり，よって明らかにLanguage Recognition Problemsの1つである。よって従来よりそのアルゴリズム化の困難さは十分に認識されていたが，Ch. H. Papadimitriouは，この問題もまたNP-Completeの1つであることを証明した。[3] 従って今後のこの問題へのアプローチにおいては，この事実を十分に認識した上で取り組まねばならない。すなわち，帯幅最小化問題はNP-Complete Problemであり，このclassに属する問題の1つに有名な古典的な問題であるHamilton Circuit Problemがあり，かつそのアルゴリズムが今日においても見い出されていない以上，本問題のアルゴリズム化はほとんど不可能と考えられる。しかしながら，一方では，NP-Complete Problemsにおいても，ある程度の難易の差があるとの研究報告もなされている。[5] さらに，通常対象とするグラフは，そんなに複雑なものではなく，対象とするグラフにある程度の制約条件を付加することが可能であることより，ある程度の難度の減少も可能と思われる。このような見地に立った研究も見られる。[6] さらに有効と思われる方法は，現実には最小化ではなく減少で十分であるとの考えに立脚し，帯幅減少法のアルゴリズム設計を考えることであろう。

3．帯幅減少法への提言

従来より提案されてきた方法はほとんどが減少を目的としたものと云える。しかしながら，その減少の基本戦略は不十分なものであり，本節においては，たとえ減少が目的であったとしてもそのアルゴリズムが具備しなければならない諸要因について述べる。Band Matrix法には固定帯幅を用いる場合と，変動帯幅を用いる場合の2種類あり，それぞれを有効に利用するには 下式で定義される半帯幅(H.B.W.)，プロファイル(P)を最小化する必要がある。

$$\text{H.B.W.} = \max_{i=1}^{n} (\alpha_i - i) + 1 \qquad (1)$$

$$P = \sum_{i=1}^{n} (i - \beta_i) \qquad (2)$$

α_i，β_iはi行の最後および最初の非零要素の位置する列番号とする。(1)，(2)が役立つのはあくまで節点に番号が付けられた場合であり，よってグラフの特性とは一応独立な関係にあると考えられる。帯幅減少法を大別すれば，

1．単純な行・列入れ換えによる方法

2．利用可能なグラフの概念を導入し，それを利用しての行・列入れ換えによる方法

3．グラフの問題としてアプローチする方法

分類1，2は，あくまで(1)，(2)式を利用するものであり 分類3とは全く異なる。

分類1にあたる方法は，この分野の初期の段階において提案されたものの多くが該当し，単純な行，列の入れ換えで減少を図ろうとする。もしA(n×n)が対称行列であれば n!の行・列入れ換えの組み合わせが存在するが，それを全て行うことは不可能であり，よってある程度の入れ換えでもってそのうちの最小値を求めようとするのが基本戦略と云えよう。よって，この方法では真の最小値を求めうる保障は全くない。

分類2の方法は今日までに提案されたアルゴリズムのほとんどであり，例えば，Spillers，[7] Cuthill-McKee，[8] Cheng[9]らの研究が挙げられよう。これらの手法の中で考慮されているグラフの概念としては次数(degree)と距離(distance)が挙げられる。Spillersの方法は次数を、Cuthill-McKee及びChengは両者を導入している。Cuthill-McKeeとChengの方法の違いは前者においては距離＝1のみが導入されるのに対し、後者では$d \geqq 2$がアルゴリズムに組み込まれている点にあり、後者の方が良い結果を導くことは云うまでもない。つぎにこれらグラフの概念の演算について考えてみると、degreeは行列の各行又は列の非零要素の個数を計算することで求まる。あるいは節点間接続行列Bが与えられていれば$B^2 = B \times B$を計算すれば、B^2のdiagonalの値がそれを示すことが知られており、これによっても次数の計算は可能である。つぎに距離について云えば、$d = 1$はB行列あるいはその特性行列の非零要素の存在個所より明らかであり、何ら計算は要しない。$d = l > 1$の関係にある節点対を求めようとするならば$B^{(l-1)} = B \times B^{(l-2)}$, $B^{(l)} = B \times B^{(l-1)}$の計算を行い、$B^{(l-1)}$以下においては零であり$B^{(l)}$において始めて非零化した要素$(i, j)$を探せば必要な節点対を見い出すことが可能である。すなわち、距離を考慮しようとすれば、行列のべき計算が必要となり、よって遠い距離にある点を入れ積極的に導入しようとすればする程、演算回数は増加する。真の最小化を図ろうとすれば、次の分類3の研究より明らかにされるように、グラフの直径方向を知る必要があり、これを満たしているのは分類2の手法の内、Chengの方法だけである。中途半端な距離のアルゴリズムへの導入は逆に最小化につながらない危険性を有することも分類3の研究より明確にされる。

分類3の手法は前2者とは全く異なり、最小帯幅値、Profileをグラフの形状特性としてとらえようとするものであり、よって節点に付される番号は全く無意味となり、この点においても前2者との違いが明らかである。(1), (2)式によれば、最小帯幅は最大番号差、Profileは番号差の総和を各々最小化することにあたり、それぞれ1次元的、2次元的な最小化問題であるといえる。これは、あくまで対象を行列とした場合であるが、もし、この行列に替えて対象をグラフとするならば、1次元的、及び2次元的最小化とは、"長さ"及び"面積"の最小化と考えられる。小西・白石・谷口の一連の研究[10]はこの考え方に立脚し、それぞれの最小化を実際に行うために1つの座標系(2次元及び3次元のものがあり、filing field[11]と呼ぶ)を提案している。2次元filing fieldを例にとれば、その2つの軸は便宜的に等間隔に区切られており、その1目盛がdistance＝1にあたる。よって、グラフの"長さ"はその座標系の1つの軸で測られ、"面積"は座標内に画かれたグラフの持つ節点数で測られることになる。したがって、帯幅最小化とは、この座標系に画かれた図形の1つの軸に添う(最大)長さを最小化するという、図形の画き方に等価となる。よって帯幅とは、この空間内の図形の"幅"ともいうべきものであって、対象とするグラフがいかに凹凸があっても、その突出部を折り曲げ全体として一様な幅をもった図形として画くことが帯幅最小化につながることになる。このためには、グラフをその長手軸方向に十分に引っ張った形として座標内に画くことが必要となるが、その長手方向の最大長さはグラフの直径に一致、もしくは、それに近いものとなり、系の直径を求めることが必要とされる。この座標系は、あくまで帯幅最小化の為に提案されたものであって、それがそのままProfileに適用はできない。すなわち、系の節点数は一定であり、座標内に、いかに図形を画いても、その面積は一定となるからである。一般に全体として凸形状のグラフにおいてはProfile最小を目的とした番号順序と、帯幅を最小として得られた番号順序には差異はほとんどないということ、その差異が出るのは対象グラフが凹凸を有するものであるということ、さらに凹凸を有するグラフの典型的かつ、シンプルなものであるトリーグラフを対象グラフとするプロファイル最小化に関する研究[12]により、そのようなグラフにおいては突出部を切断して各subgraphに関してProfile最小化を図り、その後それらの接続にのみ注意すれば系全体のプロファイル最小化が行えることが知られており、さらに、全体として凸形状のグラフに対してはfiling fieldが有効であることより、複数個のfiling fieldを用いればProfileの最小化が図れることがわかる。それら複数個のfiling fieldを$F^{(0)}, F^{(1)}, \cdots, F^{(i)}, F^{(i+1)} \cdots$とするとき、$F^{(i+1)}$の中に画かれる図形の面積(節点数)を小さくし、そのかわりに$F^{(i)}$内の図形の面積を大きくする方が、その逆よりもProfileが小さくなる。

このことより、Profile最小化は"グラフの面積"の最小化に等しいと云える。

これら一連の研究は[10,11,12]、計算機用アルゴリズムの開発を目ざしたものでなく、人間が目でみて判断しながら行う図式解法であり、そのままの形で計算機用アルゴリズム化は困難と思われる。しかしながら、これら一連の研究により、少くとも帯幅最小へ導びくためのアルゴリズムの具備しなければならない条件が明確化されたといえる。まず、グラフの長手軸がその条件として挙げられるが、これを節点番号付けで考えるならば、Label 1, 2, … といった若い番号を付す節点の選定が厳密に行なわれねばならないことを示している。この条件を満たすアルゴリズムとしては Cheng の方法が唯一のものであり、他は全てこの条件を満たさない。つぎに、対象とするグラフの点密度を一様化した時、(すなわち filling field のような点分布状態が得られたとき)、そのグラフが全体として凸形状であれば、その帯幅減少にはなんら困難はなく、分類2に報告するほとんどのアルゴリズムを用いて十分良い結果が期待される。しかしながら、もしその図形が多くの突出部を有するような場合、固定帯幅の減少は非常に困難なものとなり、このような系に対し有効であるような自動アルゴリズムは今日までには開発されていない。すなわち前述の全てのアルゴリズムは、真の汎用性を有してはいないといえる。

一方、小西・白石・谷口らの研究により ①、このような突出部を有するグラフに対しては Profile 法が有効であり、②、Profile最小化においてはグラフは subgraphの集合体としての取り扱いが可能であること、③、その subgraph は全体として凸形状であり、もしそうであれば前述の諸アルゴリズムが十分適用可能であること、さらに④ 自動プロファイル最小化を目的とした時の subgraph間の取り扱い、すなわち番号順序の与え方がすでに明らかにされていること[12]等の理由により、もし対象系が多くの突出部を有するならば、その系に対しては Profile 法を適用するのが有効であろうことが結論として導かれ出される。固定バンドマトリクス法、変動バンドマトリクス法のプログラムは本質的に差はなく共に容易に組めるものであり、入力データ作成法のみ異なるということも上述の結論を支える1つの理由である。

4. あとがき

本研究第2節で概説したように、固定帯幅、プロファイルを最小化する問題は今日の計算機を用いては一般的に不可能な問題といえよう。しかしながら、第3節での考察により、対象系を限定すれば、すなわち凸形グラフに対しては現存するアルゴリズムでもって十分良い結果が導びかれうることが示され、また、たとえ対象グラフが多数の突出部を有していても、それに対しては Profile 法が有効であり、かつその Profile法を有効に用いるための Profile最小化についても、ほとんど最小化可能と思われるアルゴリズムの概容の設計がなされたことより、Band Matrix 法は、その解析アルゴリズムのシンプルさ、及び適用の容易さもあいまって今後も十分に利用しうるものと考えられる。

このようにNP-Complete Problems の1つである帯幅最小化については1つの解決策が見い出されたといえようが、土木工学の様々な分野においても NP-Complete Problemsに出合う場合が数多くみられる。例えば整数計画法なども その1つであり、その適用においては対象とする問題の大きさに十分に注意を払う等の解決策を用いない限り実さいの演算は不可能といえる。

参考文献

1). G.G. Alway & D.W. Martin, Computer Journal, Vol. 8, 1965, pp. 264−272, 2). R.M. Karp, Complexity of Computer Computations, Plenum Press, 1972, pp. 85−103, 3). Ch.H. Papadimitriou, Computing 16, 1976, pp. 263−270, 4). A.V. Aho et al, The Design and Analysis of Computer Algorithms, Addison-Wesley, Chapter 10, 1974. 5). S. Sahni & T. Gonzales, 15th Annual Symposium on Switching and Automata Theory, 1974, pp. 28−32. 6). M.R. Garey & D.S. Johnson, Proc. 6th Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 1974, pp. 47−63. 7). W.R. Spillers & N. Hickerson, Quarterly of Applied Mathematics, Vol. 25, 1968, pp. 425−432. 8). E. Cuthill & J. McKee, Proc. of ACM National Conference, 1969, pp. 157−172. 9). K.Y. Cheng, Computing 11, 1973, pp. 103−110. 10). I. Konishi, N. Shiraishi & T. Taniguchi, Journal of Structural Mechanics, 4(2), 1976, pp. 197−226. 11). T. Taniguchi, Application of Topology to Band width Reduction Method of Structural Stiffness Matrix, Dissertation to Kyoto Univ. 1974, 12). 白石成人・谷口健男, 電算機利用に関するシンポジウム講演概要, 土木学会, 1976年11月, pp. 5−8