NP-Complete Problem としての Renumbering 問題に関する一考察

岡山大学工学部　正会員　○谷口健男
京都大学工学部　正会員　白石成人

1. まえがき

有限要素法や差分法といった数値解析法においては 最終的には 多元連立一次方程式を取り扱わねばならず 今日までに 帯行列法, プロファイル法, スパースマトリクス法といった様々な計算法の提案が行なわれた。しかしながら これら手法は それ自身では その有効さを発揮することはできず, それぞれの手法固有の入力データ量の最小化がなされて始めて 有効となりうるものである。この入力データ量の最小化法は 一般に Reordering法(あるいは Renumbering法)と呼ばれ, 帯行列法に対しては 得られる行列の半帯幅を最小にするような, プロファイル法に対しては行列内の非零要素の存在領域の面積を最小にするような Renumbering が, また スパースマトリクス法に対しては 消去過程において非零化する零要素(フィル・インと呼ばれる)の数を少くするような消去順序付け(Reordering)が必要であり, 近年様々なアルゴリズムが提案されている。[1),2),3)]
これら Reordering (Renumbering) の問題は Alway & Martin の論文[4)]でも指摘されているように グラフの問題であり, それらアルゴリズムの有効さは 組み合わせ数 をいかに減少させうるかにかかっているといえよう。

一方情報工学の分野における研究により 帯幅およびプロファイルを最小にさせる問題は NP-Complete 問題(脚注1)に属することが明らかにされ, この結果 一般的にいって これらを最小化させる有効な, かつ汎用的なアルゴリズム開発は ほとんど不可能(intractable)であることが証明されるに至った。[5),6)] この結果より 以下に示す事柄が推論されよう。

1. 今日までに提案されている様々なアルゴリズムは 少くとも汎用性に欠ける。
2. 系の大きさを限定さえすれば 最小化アルゴリズム設計は可能である。

本研究では 上記推論のうち 特に2に注目して, 任意の系に対する半帯幅, プロファイル およびフィル・インの最小化アルゴリズム開発の可能性を調べる。その為に まず次章において 上述した3つの最小化に必要な手法の概略を述べ, その結果を第3章で いわゆる NP-Complete 問題の困難さと照らし合わせることにより 手法のアルゴリズム設計の可能性を探る。

2. Renumbering and Reordering Problem

本節においては 帯行列法, プロファイル法, スパースマトリクス法の為の Renumbering (Reordering) 問題 すなわち 半帯幅, プロファイル および フィル・インを最小化させる手順の概略を述べる。

2.1 最小帯幅問題

この問題に関しては 文献7)にくわしく述べられているので略記する。1つの行列A(次頁脚注2)の半帯幅(HBWで示す)は 次のように与えられる。

$$HBW = \max(\alpha_i - i), \quad \text{ただし } i=1,2,\cdots,n \tag{1}$$

ここで α_i は A の第i行の最終非零要素の位置する列番号とする。上式より 一般的な最小帯幅問題は Aの行, 列を入れ換え HBW を最小化する問題であると認識されるが, これをつぎにグラフの問題に置換する。

(脚注1): Nondeterministic Polynomial Time Complete Problem の略。これに属する有名な問題に Hamilton Path, Maximum Clique 等があげられ, ある問題が この問題に属することが証明されれば 一般的にいって その有効なアルゴリズム開発は ほとんど不可能と考えられている。[12)] しかしながら, 他の研究によれば その困難さにも差があることが示されている。

$A(n\times n)$ に対し n 個の節点を準備し，A の上三角領域内の全要素に対し もし $a_{ij}=1$ ならば i, j 両点を1本の線で結び，もし $a_{ij}=0$ ならば結びつけないという操作を行うことにより A の1つのグラフ表現を得る。これを $G(n, m)$ で示すが ここで n は節点数，m は線数を示す。このようにして得られた G を文献7に示される帯幅最小化法に従って画き直してみると 画き直された図形の第i番目縦点列の占める縦座標 H_i とその縦点列内の少くとも1点との間において下式が成り立つ。

$$HBW_i = H_i \tag{2}$$

ここで HBW_i は第i番目の縦点列内の諸点の占める最大半帯幅値。これより，グラフ全体の HBW は全ての縦点列の H_i の比較により得られることになる。すなわち，

$$\begin{aligned} HBW &= \max HBW_i \\ &= \max H_i , \qquad \text{ただし } i=1, 2, \cdots, \alpha \leq d_0 \end{aligned} \tag{3}$$

ここで α は画き直された図形の縦点列の個数をあらわし，それは G の直径 d_0 より少い。(3)式より帯幅最小化問題は 画き直されたグラフの最大縦点列の節点数を最小にする問題であることがわかり，いわゆる図形（グラフ）の幅が 元の行列 A の最小半帯幅を支配することが得られる。

2．2 最小プロファイル問題

前節で用いた行列 A においてプロファイル P を定義する。第i行に関して最初の非零要素の位置する列番号を β_i とすれば P は下式で与えられる。

$$P = \sum_{i=1}^{n} (i - \beta_i) \tag{4}$$

すなわち A の対角要素と各行における最初の非零要素に囲まれる領域が P である。A の行，列を任意に入れ換えても P の中に占める非零要素数は一定(m)であることより $\min P$ は P の中に占める零要素数（ロスと呼び L_0 で示す）の最小化となる。

$$\min P = \min L_0 \tag{5}$$

次式で示される A に対する前進消去過程，

$$\tilde{a}_{jk} = a_{jk} - a_{ij}\cdot a_{ik} / a_{ii} \tag{6}$$

すなわち i 行の消去により a_{jk} がその値を変え $\tilde{a}_{jk}$ となることを考慮すれば L_0 は次の2つに大別される。

ⓐ 消去前零であったものが 消去後 非零化する ： $a_{jk}=0 \longrightarrow \tilde{a}_{jk}\neq 0$

ⓑ 消去前・後を通じて零のままである ： $a_{jk}=0 \longrightarrow \tilde{a}_{jk}=0$

ⓐをフィル・インと呼び F で，また ⓑをゼロと呼び Z で示すと ロス L_0 は下式のようになる。

$$L_0 = F + Z \tag{7}$$

(5)，(7) 両式より

$$\min P = \min L_0 = \min (F + Z) \tag{8}$$

(8)式において $F=0$ の状態を考えると

$$\min P = \min L_0 = \min Z \tag{9}$$

これはトリーグラフ等特殊なグラフに対するプロファイル最小化問題に帰着する[8]。また $Z=0$ を仮定すれば

$$\min P = \min L_0 = \min F \tag{10}$$

これは，次の2．3節で扱われる最小フィル・イン問題となる。しかしながら(9)，(10)両式は特殊なケースであり一般的な $\min P$ には(8)式を扱わねばならない。(8)式において 右辺の2つの項について調べると次のような結果を得る。

（脚注2）： A は元の行列 $\tilde{A}$（正定値・対称をいま仮定する）より自由度 および $\tilde{a}_{ij}$ なる値を無視して得られる いわゆる 0．1 行列とする。

第1項：$F=0$ が成り立つのは特殊なグラフに限定され一般的には $F>0$。この項のみの最小化には次節の結果よりグラフの分割が必要となる。さらに各部分グラフにおいては等距離節点集合列（脚注3）が成り立つ。

第2項：いかなる G に対しても $Z=0$ なる renumbering は可能であるが、その為には G の分割をしてはならず、G 全体を等距離節点集合列にしなければならない。しかしながら G の形状（脚注4）によっては $Z \neq 0$，すなわち G の分割により L_0 を少くしうることが知られていることより $Z=0$ により min L が行いうるのは限られたグラフにおいてであることが推測される。

これより、少くとも任意の G を対象として min L_0 を行うには、G をいくつかの部分グラフの集合に置換し、それぞれの部分グラフにおいては $Z=0$，従ってその部分の Fill-in の最小化を図ればよいと考えられる。G より部分グラフの集合への置換法が見つかれば

$$\min L_0 = \min F + \min Z \tag{11}$$

が成り立ち、(11)式第1項は各部分グラフに対し、第2項はその置換法に対し行えばよいことになる。くわしく云えば、min F は各部分グラフの等距離節点集合列への置換により、また min Z は分割された各部分グラフに含まれる節点数により定まる。[8]

2.3 最小フィル・イン問題[10]

非零要素のみを入力データとして扱うスパースマトリクス法では、その他に消去過程において非零化する要素のスペースを必要とする。この付加的スペースを最小化するのが最小フィル・イン問題である。行列 A のグラフ表現 G に含まれる n 節点のうち $(i-1)$ 個の Vertex Elimination[11] を終えた状態を考えると未消去点は 1). 消去領域に隣接している節点と 2). 隣接していない節点に分けられる。(6)式より、ある点 v を消去した時 v に隣接する節点（これを adj.v で示す）は完全グラフを構成する。このような完全グラフを FVG と呼ぶと、第 i 番目の消去点 v_i は 1). $v_i \in$ FVG，2). $v_i \notin$ FVG のいずれかである。v_i 消去による影響は adj.v_i に限られることを考慮すれば i 番目の消去点 v_i には次の5つのタイプしか存在しない。

Type 1.　$v \notin$ FVG
Type 2.　$v \in$ FVG，adj.$v \cap G_N \neq \phi$
Type 3.　$v \in$ FVG，adj.$v \cap G_N = \phi$
Type 4.　$v \in$ FVG's，adj.$v \cap G_N = \phi$
Type 5.　$v \in$ FVG's，adj.$v \cap G_N \neq \phi$

ここで G_N は FVG 以外の未消去点を示す。min F を目的とする限り Type 5 は除かれ、Type 4 として最大2個の FVG's を考えればよい。[10] Type 1〜4 の各消去による FVG の変化を考えると Type 1 ⇒ FVG の発生，Type 2 ⇒ FVG の発達，Type 3 ⇒ FVG の縮小，Type 4 ⇒ FVG の合併と名づけられる。文献10）によれば、少くとも min F を目的とする限り、これら4種がくり返されるだけであって、一般的な Optimal Elimination Ordering により FVG(1) の発生→発達→停止→新たな FVG(2) の発生→発達→停止→ FVG(1) と FVG(2) の合併→縮少→発達→ …… が示されている。このプロセスにおいて最も重要なステップは FVG の停止（$\overline{\text{FVG}}$ で示す）である。すなわち $\overline{\text{FVG}}$ で囲まれる領域は Type 1 が消去される1点を除き全て Type 2 により消去される。すなわち、この領域は1個の連結部分グラフを構成するのみならず、等距離節点集合列を構成する。このことより、G に対する $\overline{\text{FVG's}}$ さえ求まれば、min F は各部分グラフに対してのみ行えばよく、それも最適な等距離節点集合列を求めるだけでよい。このように、最小フィル・イン問題はグラフの分割により行いうるものである。

（脚注3）：等距離節点集合列とは G の任意の1点，もしくは任意の連結部分グラフを l_0，l_0 内の各点よりの距離が1に等しい諸点より構成される G の部分グラフ（非連結であってもよい）を l_1 と順次 G の全ての点を l_0 よりの距離で部分グラフに分けた時出来る部分グラフの列 $\{l_0, l_1, l_2, \cdots, l_\alpha\}$ のことを云う。ただし l_α は l_0 よりの距離が α なる節点集合をいい，α はこの場合の最大距離を示す。

（脚注4）：例えば9)に示される分岐を有するトリーグラフおよび分岐を有するトリー構造が該当する。

3. 最小化手法のアルゴリズム化

前章において　任意に与えられた行列Aの示すグラフGに対する帯幅，プロフィルおよびフィルインの最小問題を扱い，それぞれを最小にしうる手法の概略を示した。本章では　これら手法の有効なアルゴリズム設計の可能性をさぐってみる。

まえがきで述べたように　これら最小化問題は組み合わせ問題であり，それらの一部はNP-Complete問題に属することがすでに示されていることより効率よいアルゴリズム設計は一般的に云って不可能と考えられる。NP-Complete問題とは，その解を得る為の演算時間が入力量の多項式(時間)で表現されるような問題であり，従ってその問題の困難さは入力量に依存すると考えられる。従って今日知られているいかに困難な問題であっても，問題の大きささえ限れば，言い換えると入力量を限れば容易に解かれうる。このことは，全ての組み合わせ問題に共通して云える。

前節の結果をみれば　最小プロフィル　およびフィルイン問題に関しては　それぞれの最小化においては系全体を一挙に扱う必要はなく全体系Gを適切に分割して得られる各部分グラフを独立に扱い，それらの最小化を図ればよいことが示されている。例えば G(n) を扱うとき，それを一挙に取り扱えば n! の組み合わせがある。一方，Gをもし α個の等しい部分グラフに分割して扱えれば　その組み合わせは n!/(α-1)!，従って前者の演算時間を T_0 とすれば，後者のそれは $T_0/(\alpha-1)!$ となる。前章の結果によれば　さらに各部分グラフにおいては等距離節点集合列による消去が可能であることが示され，このことは　各部分グラフ内においてすら，そこに含まれる節点の全ての組み合わせを考える必要はなく，第1番目の消去点をうまく見い出すことができれば，その点よりの隣接点を順次次の消去点とすればよいことを示し，従って演算時間は更に大幅に減少することがわかり，以上の考察より　プロフィルおよびフィルイン最小化手法の有効なアルゴリズム設計は可能であることがわかる。

一方，帯幅の最小化においては　画き直されたグラフの最大高さの最小化が必要とされる。分岐のないトリー構造[9]においてはその最大高さはグラフの幅と一致するが，例えば分岐のあるトリー構造においては一致せず，グラフの突出領域を適切に折り曲げることにより画き直されたGの縦点列を最小にする必要があり，この為にはG全体を一挙に扱う必要がある。言い換えれば G全体に含まれる節点の組み合わせが必要となる場合があることがわかり，そのような系に対する有効なアルゴリズム設計は非常に困難なものとなる。しかしながら　分岐のないトリー構造に対しては　画き直された図形の各縦点列が等距離節点集合列を構成することより　そのアルゴリズム設計は可能であるといえる。

4. あとがき

連立一次方程式の各種数値計算法を有効に利用する為に必要な Renumbering (Reordering) Algorithm は今日までに数多く提案されているが，それ以前の問題，すなわち　そのようなアルゴリズムは　はたして作ることができるかという問題に対する答はいまだ見られない。本論文においては　この問題を取り扱い次の結論を得た。

1. プロフィル　および　フィルインを最小化させるアルゴリズム設計は可能。

2. 帯幅を最小化させるアルゴリズム設計は困難であるが，系を限定すれば可能。　しかしながら以上の結果よりすぐに　それぞれのアルゴリズムが作られうるというものではなく，グラフの分割手法　および等距離節点集合列を求める方法が提案されて始めて　それらアルゴリズム設計が可能となる。

参考文献　1). E. Cuthill & J. McKee, Proc. of ACM National Conference, 1969, 157-172，　2). N.E. Gibbs et al, SIAM J. of Numerical Analysis, Vol.13, No.2, 1976, 236-250，　3). K.Y. Cheng, Computing, 11, 1973, 103-110，　4). G.G. Alway & D.W. Martin, Computer J., Vol.8, 1965, 264-272，　5). Ch.H. Papadimitriou, Computing, 16, 1976, 263-270，　6). M.R. Garey et al, Proc. 6th Annual ACM Sympo. Theory of Computing, 1974, 47-63，　7). I. Konishi et al, J. of Structural Mechanics, Vol.4, No.2, 197-226，　8). 白石他，マトリックス解析法論文集(日本鋼構造協会), 1979, 97-102，　9). 白石他，第3回電算機利用シンポ，1978, 81-84，　10). 谷口，白石，マトリックス解析法論文集(日本鋼構造協会), 1979, 103-108，　11). D.J. Rose, Graph Theory & Computing, 1972, 183-217，　12). R.M. Karp, Complexity of Computer Computations, 1972, 85-103