スパースマトリクス法の利用に関するグラフ理論に基づく一考察

岡山大学工学部　正員　○谷口健男
松尾橋梁　安田克典

1. まえがき

有限要素法や差分法といった連続体の離散的近似理論等のマトリクス構造解析においては，必然的に巨大な連立一次方程式を解かねばならず，従来よりさまざまな有効な数値解法が提案されてきたが，スパースマトリクス法もその一つである。この方法の特徴は係数行列に含まれる非零要素のみを入力データとして扱う点にあり，ある程度以上の大きさの系に対し最も有効となりうる。一般に消去過程において行列内に新たな非零要素（フィルイン）の発生がみられ，しかもその個数は消去順序によって異なる。従って，この方法における入力データ数は（非零要素数＋フィルイン数）と（それら非零要素の行列内の位置を示すインデクス）の和となる。すなわち，スパースマトリクス法を最も有効に利用しようとするならば，フィルイン数を最小にする消去順序を与えねばならないが，今日までに提案されている方法としては，Minimum Degree Algorithm，Minimum Deficiency Algorithm,[1] Nested Dissection法[2]であり，いずれも一般には最小値を与えることができない。

本研究では，このMinimum Fill-in Problemに対しグラフ理論に基づく考察および数値実験を行うことにより，最小フィルインを目的とする消去順序に関する基礎的研究を行う。

2. 消去順序に関するグラフ理論的考察

消去過程において（N×N）の係数行列Mの（j, k）要素 m_{jk} が(1)式のように m^*_{jk} となる。

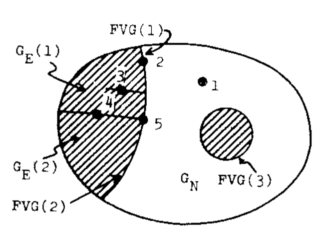
$$m^*_{jk} = m_{jk} - m_{ji} \cdot m_{ik} / m_{ii} \qquad (i < j < k) \qquad (1)$$

フィルインとは(1)式において，たとえ $m_{jk}=0$ であっても $m^*_{jk} \neq 0$ となるような（j, k）要素を示す。行列Mを簡単のために，正定値・対称と仮定（一般に構造解析ではこの仮定を満たすものが多い）すると，M(N×N)をN個の点を有する1つの無向グラフ，G(N)，として表現しうることが知られている。このグラフを用いると，フィルインは次のように解釈される。行列Mにおいて，j, k両点間に"線"が存在しなかったとしても，もし(i, j), (i, k)間に線が存在すれば i点消去後には(j, k)間に新たな線が発生する。すなわち，フィル・インとは付加的な線のことである。従って，フィル・イン数が消去順序で異なることは，G(N)に含まれるN個の点の消去順序のちがいによって，それぞれの消去過程で発生する新たな線の総数がことなることを示す。

(1)式およびそのグラフ的解釈より，1つの点，x，の消去により その点に隣接（線で直接つながっている）している諸点（adj. x）は互に隣接関係を有することになり，これはすなわち これら点グループが完全グラフ，G_c，を構成する。この点グループをFVGと呼ぶことにする。以下の考察はMに替えてGにおいて行う。

G(N)に含まれる諸点のうち，(i-1)個の点の消去が終ったと仮定すると Gは消去領域 G_E と未消去領域 G_N に分けられ（右図），i番目の消去点，x，として 次の5つのタイプが考えられる。

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



A Stage of Elimination Process on G

これらのうち，4.と5.を比較すれば明らかに前者の方がフィル・インが少く，従って最適消去順序を考察する場合，5.は考慮する必要はなく，1〜4のみを考えればよい。

これら4つのタイプについて発生するフィルイン，Fi，を計算すると下式のようになる。

1. $Fi = |adj.x|\cdot(|adj.x|-1)/2 \;-|E_0|$ (2)

2. $Fi = |adj.x|\cdot(|adj.x|-1)/2 \;+|adj.x|\cdot(|FVG|-1) \;-|E_1| \;-|E_2|$ (3)

3. $Fi = 0$ (4)

4. $Fi = (|FVG(1)|-|FVG(1)\cap FVG(2)|)\cdot(|FVG(2)|-|FVG(1)\cap FVG(2)|)$ (5)

このように評価される1～4の節点消去について，特にフィルインに影響を及ぼす要因を考察してみる。

1. は $x \in G_H$ の消去を示し，これにより新たなFVGが発生する。この場合 Fiに影響を及ぼすのは $|adj.x|$ のみであり，xの次数が小さければ，あるいは $\{adj.x\}$ が G_C に近ければ Fiは少いと云える。

2. は $x \in FVG$ の消去であることより FVGの個数は変化せず 元のFVGが修正されるだけである。このFiに影響を及ぼす要因は $|adj.x|$，$|FVG|$ であり，それぞれが小さければ Fiは小さい値しか与えない。

3. の消去はフィルインに無関係であり，このような点が存在すればただちに消去すればよい。

4. の消去によって 2個のFVGが合併して 1個のFVGを作る。この新しいFVGは $\bigcup_{i=1}^{2} FVG(i)$ であり，その際発生するFiは $\{|FVG(1)\cup FVG(2)|-|FVG(1)\cap FVG(2)|\}$ によって定まることは(5)式より明らかである。

最適な消去順序は 上記4つのパターンの組み合わせとして見い出されることは自明である。

3. FVGに関する考察

前節の結果，Gに対し消去を進めると必然的に未消去領域と消去領域の境界にFVGが発生し，その大きさがFiの値に大きな影響を及ぼすことが明らかとなった。本節の目的は このFVGの大きさに関して考察を加えることにある。

前頁の図を optimal elimination process のある段階と仮定する。例えば $G_E(1)$ 内に位置する諸点を連続的に消去することにより図中のFVG(1)を与えうることは自明であり，従って次の事柄を得る。

"Gの最適消去順序は，Gを適当な部分グラフの集合に置換し，各部分グラフの最適消去順序を求めることにより与えられる。"

これより，タイプ2の消去の停止する時のFVGが重要となる。すなわちGの部分グラフの境界は，このような進展の停止したFVGで決定される。このFVGを探るために，Gに対しMin. Def. Al. を適用し，フィルインがより少くなるように番号を付け直すという一種の数値実験を行った。対象は，外周辺形状が矩形のFEMモデル（△要素および□要素），及び 5点差分モデル，および，外周辺形状がL形，T形，十形である。この数値実験により 次の2式を得た。

$$|FVG| \leq |\,\text{Minimal } x,y \text{ Separator}\,| \quad (6)$$

$$\text{Max.}\,|FVG| \leq \text{Max. of } \{\text{Minimal } x,y \text{ Separator}\} \quad (7)$$

$$x,y \in X \text{ in } G, \quad \text{and} \quad x \notin adj.\,y$$

Minimal Separator とは Gを2個の部分グラフに分割するようなGの部分グラフであって，その部分グラフはもはやGを分割しえないようなものを云う。従って Minimal x,y Separator は，上記条件を満たす任意の2点x，yをそれぞれの部分グラフに含めるようなMinimal Separatorのうちの最大のものを示す。

進展の止まるFVGは(6)式を満たしており，Gを通じて発生する最大のFVGは(7)式を満たす。(7)式を簡単に云えば，最大のFVGは，Gの最大幅の位置において発生することを示す。

4. あとがき

本研究の成果は，いわゆるNested Dissectionの概念に一致する。しかしながら，Nested Dissectionは一意的にGを分割するに対し，本研究の成果は 系によって分割パターンが大きく変化することを示しており，この点が全く異なっている。なお発表当日，分割パターンをスライドで示す。

[参考文献] 1). D.J.Rose, Graph Theory and Computing (Ed. by R.C.Read), 1972, pp. 183–217

2). Alan George, SIAM Journal of Numerical Analysis, Vol. 10, No. 2, April 1973, pp. 345–363