連立一次方程式の解法へのスパーシティーの利用

岡山大学工学部　正員　○谷口建男
川田工業　正員　木本耀幸
CRC　正員　鈴木昌次

1. まえがき　有限要素法・差分法といった数値解析において，最終的には多くの零要素を含んだ係数行列を有する連立一次方程式に帰着する場合が多く，それを解く手段は　ガウス消去法を基本とする直接法と，近似解を求める間接法に大別される。前者においては有限回の演算で解が決まる利点はあるものの，演算途中で零要素が非零化し，その為の容量を確保しなければならない欠点を有する。一方，後者は，元の非零要素だけを用いて解を得ることができるという　容量的な利点を有する反面，解の収束性に関して不安を持つ。本研究においては　前者に対してこの非零化要素（フィル・イン）数の最小化法を提案し，更に　後者に対して容量の増加と　収束性との関係を探る。

2. フィル・イン最小化法　レギュラーメッシュ（正方形領域を $\alpha\times\alpha$ に分割したもの）の連立一次方程式

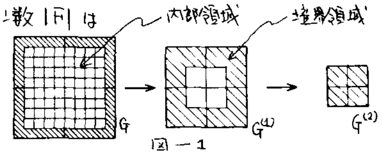
$$A\cdot x = b \tag{1}$$

を直接法で解く場合に現われる消去過程は，行列 A をグラフに置き換えると，節点消去過程に相当し[1]，i 番目の節点 v_i の消去により発生するフィルイン数 $|F_i|$ は下式で与えられる。

$$|F_i| = d(v_i)\cdot\{d(v_i)-1\}/2 - |L_i| \tag{2}$$

ここで $d(v_i)$ は v_i に接続している線の数であり，次数と呼ばれる。また $|L_i|$ は v_i の隣接節点間の線数を示す。(2)式からもわかるように，v_i の消去により v_i に隣接する節点集合は完全グラフとなり，これを FVG と呼ぶことにする。n 点を有するグラフの全ての節点を消去した時発生するフィル・イン数 $|F|$ は

$$|F| = \sum_{i=1}^{n}|F_i| \tag{3}$$



図－1

G の点を順次消去することにより FVG が発生し FVG に含まれる点の次数は増加する。(3)式より $|F|$ を小さくする為には，1). FVG の大きさを小さく保つ，2). $|L_i|$ を大きくする。1)を考慮した方法はすでに提案されているが　必ずしも最小値を与えるとは限らない。G の点を 1 つとばしに消去すれば，少くともある個数の節点まで 1).を満たすことは可能であるが，それ以上の節点消去に関しては他の何らかの方針が必要となる。ここで 2). を考えてみよう。たとえ前段階において多くのフィルインが発生していても，それがもし FVG の合併[2]（2 つの FVG's の共有点消去）において (2)式の $|L_i|$ として働けば　この段階における $|F_i|$ は少くてすむ。このことより　レギュラーメッシュの内部領域に対する消去法として図－1に示すような同じ大きさの FVG を順次発生させる方法が考えられ，事実この方法は Nested Dissection 法[3]に一致している。つぎに，境界領域における消去を考える。境界上の点の次数は明らかに内部点より低く，内部領域で発生した FVG の大きさに到るまでには　内部領域におけるよりも多くの点を消去しうる。従ってこの部分の消去は，ある程度内部領域にまで入り込む。いま　この境界領域においても　内部領域とほぼ同じ大きさの FVG を持つように消去された状態を考えると，元のグラフ G は，再び次数がほぼ一定，しかし前よりは大きな次数の新たなグラフ $G^{(1)}$ になる。従って，これまで述べてきた事柄が再度 $G^{(1)}$ に対しても成り立つことになる。以上より　G に対する消去は，次に示すような一連のレギュラーメッシュに対する最適消去（最小次数を用いる）に一致する。

$$G \rightarrow G^{(1)} \rightarrow G^{(2)} \rightarrow \cdots\cdots \tag{4}$$

N	N O.	G D	N.D.
2	1	1	1
3	11	11	
4	28	28	28
5	64	64	
6	113	113	
7	191	200	
8	288	300	300
9	416	426	
10	573	573	
11	755	777	
12	976	1016	
13	1236	1273	
14	1529	1553	
15	1871	1893	
16	2256	2280	2280
17	2636	2672	
18	3093	3097	
19	3571	3711	
20	4084	4228	
21	4680	4802	
22	5309	5425	
23	5967	6145	
24	6740	6928	
25	7480	7727	
26	8297	8421	
27	9155	9395	
28	10048	10312	
29	11068	11246	
30	12121	12245	
31	13279	13367	
32	14512	14588	14588
64	83440	83744	83744

表－1

上記考察よりも明らかなように、各レギュラーメッシュにおける周辺領域に対する消去は順次内部領域に入り込み最終グラフにおいては、グラフ全体が周辺領域と考られることになる。以上の考察に基づいた一連のレギュラーメッシュ（N×N）に対する数値実験結果を表－1に示す。N.O.，G.D.，N.D はそれぞれ、今回の方法，文献4)，文献3)の方法を示す。なお、今回提案した方法は非常にシステマティックな方法であり そのアルゴリズム化は十分可能であることより 実用に供しうるものと考えられる。実際の分割方法については紙面の都合上省略するが 発表当日具体例を示す。

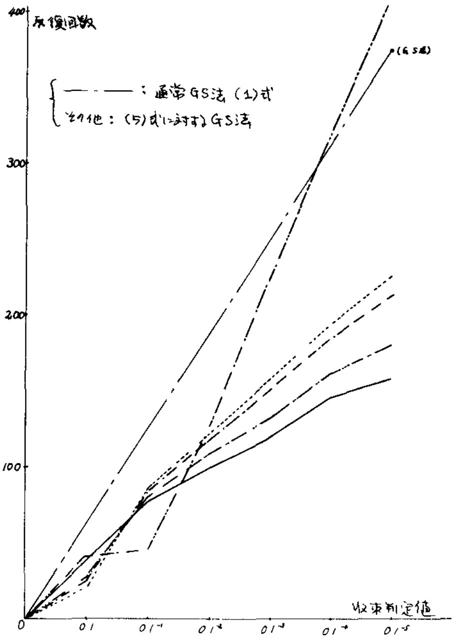
3. 係数行列内非零要素数と、ガウスザイデル法の収束性

上述したように、直接法を用いる限りその非零要素以外にフィルインの為の容量が要求される。一方、間接法においては 非零要素数だけの容量でありかわりに、解の収束性が問題となる。連立一次方程式の係数行列Aの中の非零要素は 例えばガウスザイデル法における前回の解と、次の解との間の差を決定するものである。すなわち、数値解の収束に関係をもっていると考えられる。本節において、この非零要素の数と 解の収束性状との関係をさぐる。この目的のために、(1)式より 次に示す方法に従い位相構造的には全く異なるが (1)式の近似解を与える(5)式を導びく。

$$\tilde{A}\cdot\tilde{x} = b \qquad (5)$$

ここでAの要素 a_{ij} と $\tilde{A}$ の要素 $\tilde{a}_{ij}$ との間において、

$$\begin{cases} \text{もし}\ a_{ij} \neq 0\ \text{ならば}\ \tilde{a}_{ij} = a_{ij} \\ \text{もし}\ a_{ij} = 0\ \text{ならば}\ \tilde{a}_{ij} = 0\ \text{又は}\ \tilde{a}_{ij} = \varepsilon \fallingdotseq 0 \end{cases}$$



図－2

(5)式に対し ガウス・ザイデル法を適用し、収束させながら、同時に 付加的な要素 $\varepsilon \longrightarrow 0$ とすれば、(5)式の解 $\tilde{x}$ は最終的には (1)式の解 x に一致する。この付加的な要素 ε の数、位置，大きさ等をパラメーターとして変化させ $\tilde{x} \to x$ への収束性状を調べた結果を図－2に示している。この数値実験結果より、収束性を高める ε の条件として、1). ε の初期値として、非零要素の 1/100 程度が良い，2). ε の個数は非零要素の70～80％が良い，3). 位置としては Fill-in の発生位置が良いが，全体に均等に配置しなければならない，4). ε の大きさは漸化的に零に収束させるのが良い が得られた。図－2よりも明らかなように 今回の数値実験では 最高で 1/2 程度まで反復回数を低下せしめることができた。以上のことより、間接法においても、直接法におけるフィル・インのような非零要素数の増加を許してやれば、収束性の改良が可能であることが確かめられたといえる。

4. あとがき

本研究を通じて まず、連立一次方程式の直接解法の為のフィル・イン最小化法の提案を行い、少くとも今回の方法は 現在のところ最小値を与えることができることを示した。ついで、間接法（ここではガウス・ザイデル法）においても、直接法と同様に付加的な非零要素の導入により、解の収束性が改良されうることを示した。今後 これらを実際に利用できるための具体的方法の開発が必要となる。

参考文献

1). D. J. Rose," A Graph-theoretic Study of the Numerical Solution of Sparse Positive Definite Systems", in Graph Thoory and Computing (ed. R. C. Read), Academic Press, 1972

2). T. Taniguchi," A Graph-Theoretic Study of the Minimum Fill-in Problem for Sparse Matrix Method", Memoirs of School of Eng., Okayama Vol.13

3). A. George," Nested Dissection of a Regular Finite Element Mesh", SIAM Jr. of Numer. Anal., 4-2, 1973, pp.345-363

4). I. S. Duff et al," On George's Nested Dissection Method", SIAM Jr. of Numer. Anal., 13-5, 1976, pp.685-695