

ガウス掃出し法における疎行列の密化挙動

田尻 太郎¹

¹ 札幌市 東区北 15 条東 4 丁目 2-5

e-mail : k_tajiri@xa.ejnet.ne.jp, Tel : 090-9524-0698

1 概要

疎行列の掃出し法において Active 列の零要素を Skip する処理を前提とすれば (Fillin Skip と呼ぶ) 未処理ブロックの非零要素 (Fillin と呼ぶ) の数を抑制する事で、掃出し処理を効率化できる。Fillin 数を抑制する方法としてここでは、未処理ブロックの列を列 Fillin 数の昇順に並べ直す方法を採用した (f-Ordering と呼ぶ)。f-Ordering の CPU 負荷は 1 回の掃出し処理の 3 倍程度と見積られるので、適切なタイミングで実行する必要がある。f-Ordering 実行のタイミングを評価するために、Fillin 配置がランダムな疎行列の掃出し法における密化挙動を検討した。なおここでは、係数行列の初期 Fillin 数の非零率が 0.2~5% 程度の疎行列を対象とする。

2 未処理ブロック非零率の推定

s 回目の掃出しステップの未処理ブロックの非零率を α_s とする。係数行列が掃出し過程でランダムと仮定すると、掃出し処理の実行速度を決める Active 列の Fillin 数は α_s に等しく、 α_s は行非零率 η の行の出現確率 $\phi_s(\eta)$ から計算でき以下となる。

$$[\eta \leq \alpha_s]$$

$$\phi_{s+1}(\eta) = (1 - k_1 \eta) \phi_s(\eta) \quad (1)$$

$$[\alpha_s < \eta]$$

$$\phi_{s+1}(\eta + k_2 \delta \eta) = (1 - k_1(\eta + k_2 \delta \eta)) \phi_s(\eta + k_2 \delta \eta) + k_1 \eta \phi_s(\eta) \quad (2)$$

ただし $\delta \eta = \alpha_s(1 - \eta)$ で、 α_s は次式による。

$$\alpha_s = \sum_{\eta} \eta \phi_s(\eta) \quad (3)$$

ここに 1) $k_1 = k_2 = 1$ 、2) $k_1 = 1 - (1 - p_s)^2$ 、 $k_2 = (1 - \alpha_s)^2$ で、1) は α_s の上限を 2) は下限を与える。

p_s は未処理行の出現確率で、

$$p_s = \sum_{\eta} \phi_s^{(0)}(\eta) \quad (4)$$

$$\phi_s^{(0)}(\eta) = (1 - \eta)^{s-1} \phi_0(\eta) \quad (5)$$

である。

図 1 に初期非零率 1% の数値結果を示す。 n は行列規模で 1000~4000。図中の実線は掃出し処理による実測値で 5 個の行列の平均。点線 (上限) 及び破線 (下限) は (1)~(5) による推定値。推定値は $\phi_0(\eta)$ と α_0 が同等なら s のみで決まるため、 $n=2000, 4000$ では、 $n=1000$ の推定値を横方向に 1/2, 1/4 シフトして比較した。

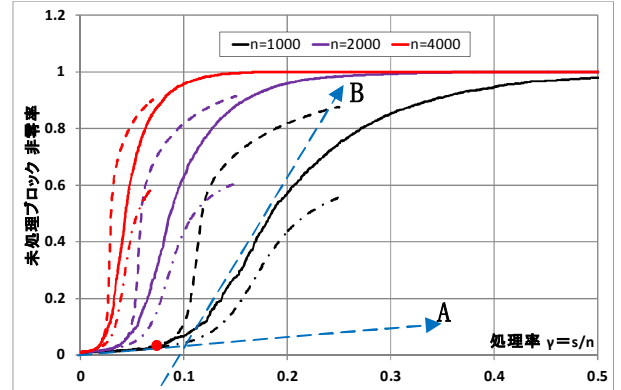


図 1 未処理ブロック非零率, $\alpha_0 = 0.01$

未処理ブロックの非零率の挙動は、概ね直線近似可能な範囲 (図 1 中 A) を通過してすぐに、ほぼ一定の速度 (図 1 中 B) で急速に増加する。f-Ordering の実用上の実行タイミングとして、推定値上下限と実測値が明確に分離する点を選んだ (図 1 中赤丸)。

(1) (2) より α_s の増分は次式となる。

$$\delta \alpha_s = \sum_{\eta} k_1 k_2 \alpha_s \eta (1 - \eta) \phi_s(\eta) \quad (6)$$

k_1, k_2 を陽に表し、 $\sum_{\eta}$ の計算を実行すれば、推定値上限に対して、

$$\delta \alpha_s = -\alpha_s^3 + \alpha_s^2 - \sigma_s^2 \alpha_s \quad (7)$$

推定値下限に対して、

$$\delta\alpha_s = \quad (8)$$

$(1-(1-p_s)^2)(1-\alpha_s)^2(-\alpha_s^3+\alpha_s^2-\sigma_s^2\alpha_s)$
 が得られる。 σ_s^2 は $\phi_s(\eta)$ の分散。掃出しの
 初期段階で σ_s^2 , α_s は十分小さく p_s も1に近いとすれば (7) (8) より、

$$\delta\alpha_s^{(0)} = -\alpha_s^3 + \alpha_s^2 \quad (9)$$

となる。掃出しの初期段階では(9)より決まる
 $\alpha_s^{(0)}$ が支配的である (図-2)。

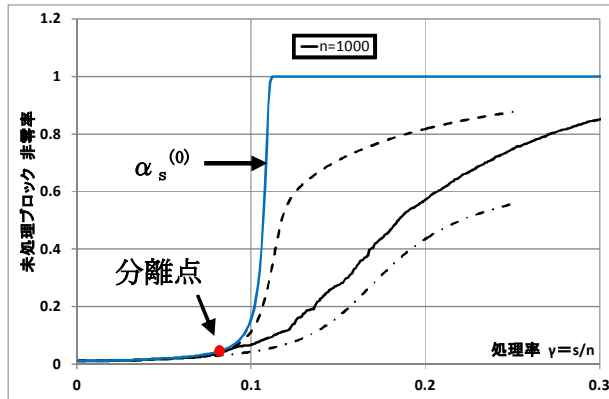


図2 分離点付近

$\alpha_s^{(0)}$ の挙動は α_s のみで決まるので、図2
 の分離点を定義する α_s の値は行列規模, 初期
 非零率に無関係決める事ができる (図3)。

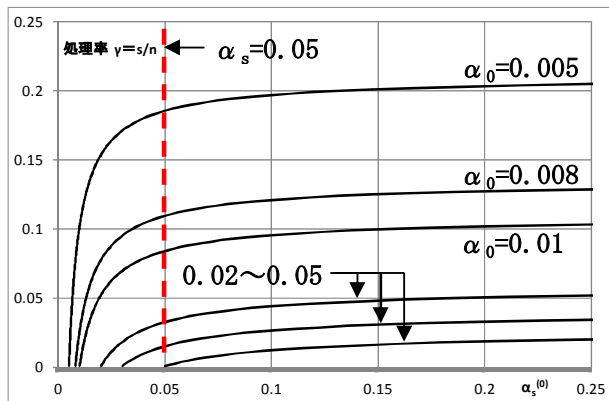


図3 $\alpha_s^{(0)}$ の挙動

ここでは $\alpha_s=0.05$ の時を分離点と考えたが、
 その時の掃出しステップ数は初期非零率のみに
 依存する事になる。表1に $\alpha_s=0.05$ に達する
 ステップ数の数値結果を示す。 $\alpha_s^{(0)}$ による予
 測と掃出しによる実測値は概ね一致する。

3 f-Ordering の実行手順

Active 列の列非零率をモニターしながら

表1 分岐点に達するステップ数

行列規模			1000	2000	4000
初期非零率 (%)	0.5	掃出結果	259	223	224
		$\alpha_s^{(0)}$	186		
	0.8	掃出結果	130	131	122
		$\alpha_s^{(0)}$	110		
	1	掃出結果	87	85	84
		$\alpha_s^{(0)}$	84		
	2	掃出結果	36	39	35
		$\alpha_s^{(0)}$	33		
	3	掃出結果	16	16	14
		$\alpha_s^{(0)}$	15		

掃出しを進め、Active 列の非零率が5%を超え
 た時点でf-Orderingを行う。未処理ブロック
 に非零率 5%以下の列がなければ f-Ordering
 処理を打ち切る。実行結果を図4に示す。縦
 軸はf-Ordering 併用時と Fillin Skip のみの
 時の演算数比。横軸は初期非零率 (%)。

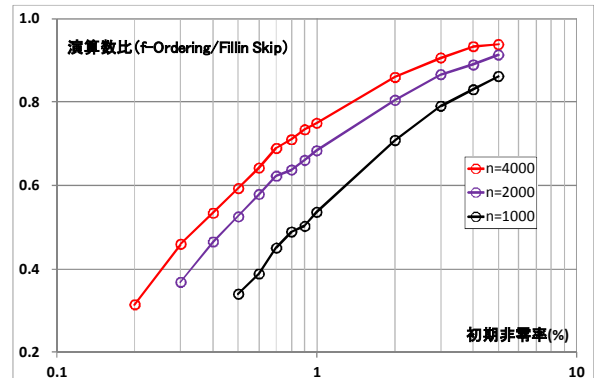


図4 f-Ordering 結果

4 まとめ

- 1) Fillin 配置がランダムな疎行列の掃出法
 における密化挙動は、概ね掃出 Step 数
 のみで決まる。
- 2) f-Ordering の実行タイミングは、行列規
 模, 初期非零率に無関係に決定する事が可
 能である。

参考文献

- [1] 小国 力他, 行列計算ソフトウェア, 丸善
 株式会社, 1991 年.