

9.3.2 計算量

ガウスの消去法により n 元の連立一次方程式を解くときの計算量を、係数行列の上三角行列への変形、それに伴う右辺ベクトルに対する変形、後退代入の3つの部分に分けて調べると、次のようになる。

係数行列の上三角行列への変形 四則演算をそれぞれ1演算と数えると、第 k ステップでの計算量は、 $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ の計算のための割り算が $n-k$ 回、掛け算と引き算がそれぞれ $(n-k)^2$ 回である。したがって合計の計算量は

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n-1} \{(n-k) + 2(n-k)^2\} &= \sum_{k'=1}^{n-1} (k' + 2k'^2) \\ &= \frac{1}{2}n(n-1) + \frac{2}{6}(n-1)n(2n-1) \\ &= \frac{1}{6}n(n-1)(4n+1) \\ &\simeq \frac{2}{3}n^3 \end{aligned} \quad (9.15)$$

となる。

右辺ベクトルに対する変形 第 k ステップでは掛け算と引き算がそれぞれ $(n-k)$ 回必要だから、合計の計算量は

$$\sum_{k=1}^{n-1} 2(n-k) = n(n-1) \quad (9.16)$$

となる。

後退代入 第 k ステップでは割り算1回、掛け算と引き算がそれぞれ $k-1$ 回必要だから、合計の計算量は

$$\sum_{k=1}^n \{1 + 2(k-1)\} = n^2 \quad (9.17)$$

となる。

9.3.3 ピボット選択

以上で述べたガウスの消去法のアルゴリズムは、実はこのままでは完全なアルゴリズムとは言えない。なぜなら、 A が正則行列であっても、上三角行列への変形の途中で $a_{kk}^{(k)} = 0$ となる場合があり、そうすると0で割ることができないため、そこから先に計算を進めることができなくなるからである。また、 $a_{kk}^{(k)}$ が0でなくても極めて0に近い値（たとえば 10^{-10} など）の場合

には、精度上の問題が起こりうる。というのは、 $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ の絶対値が極めて大きくなるため、第 k 行にこれを掛けたものを第 i 行から引いたとき、情報落ちが起こって精度が悪化するからである。

そこで、第 k ステップにおいて消去を行う前に、 $a_{ik}^{(k)}$ ($i = k, k+1, \dots, n$) の絶対値を見比べ、もっとも絶対値の大きい行と第 k 行とを入れ替えるという操作を行う。これを**ピボット選択**と呼ぶ。これは、元の連立方程式で言えば、式の順番を入れ替えることに相当する。

数値例 3元の連立一次方程式を解く例を以下に示す。

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 6 & 4 \\ 4 & 6 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 19 \\ 23 \end{pmatrix} \quad (9.18)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -5 \\ 0 & -2 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -5 \\ -9 \end{pmatrix} \quad (9.19)$$

ここで、 $a_{22}^{(2)}$ は0なので、このままでは第2行による消去を行うことができない。そこで、第2行と第3行とを入れ替えると次のようになる（右辺ベクトルも同時に入れ替えることに注意）。

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -2 & -5 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -9 \\ -5 \end{pmatrix} \quad (9.20)$$

入れ替えの結果、(2,2) 要素は0でなくなったので、第2行による消去を行うことができる。ただし、この例では、この段階で係数行列は既に上三角行列になっており、第2行による消去を行わずにこのまま後退代入へと進むことができる。

上の数値例では、ピボット選択を取り入れることによってガウスの消去法を行うことができたが、一般的にピボット選択を取り入れれば、どんな連立一次方程式でも解けるのだろうか。これについては、次の定理が成り立つ。

定理 連立一次方程式 $Ax = b$ において、係数行列 A が正則ならば、ピボット選択付きのガウスの消去法によって必ず解を求めることができる。

証明 ピボット選択付きのガウスの消去法において、計算途中で先へ進めなくなる場合を考えると、これは $a_{ik}^{(k)}$ ($i = k, \dots, n$) がすべて0の場合だけである（このときは、ピボット選択でどの行を選んでも第 (k, k) 要素を0でなくすることができない）。このとき、行列中の $a_{k, k+1}^{(k)}$ を左上隅の要素とする $(n - k + 1) \times (n - k)$ 小行列に着目すると、(列より行のほうが多いから) こ

の行列の $n - k + 1$ 本の行ベクトルは一次独立でない。次に、全体行列の第 k 行から第 n 行の $n - k + 1$ 本の行ベクトルを考えると、これらは小行列の行ベクトルの先頭に k 個の 0 を付け加えたものであるから、やはり一次独立でない。したがって、第 k ステップにおける係数行列は一次独立でない行ベクトルの集合を含むから、正則でない。一方、この行列は最初の係数行列 A に対し、ある行から別の行の定数倍を差し引くという操作（行基本変形）を繰り返して得られたものであるが、この操作は行列の正則性を変えない。したがって、元の係数行列 A も正則でないことになる。以上より、ガウスの消去法が途中で先へ進めなくなるのは、 A が正則でない場合のみであることがわかった。この対偶を取ることで、 A が正則な場合はガウス消去法は最後まで進めることができ、解 $\mathbf{x}$ を求められることがわかる。

この定理より、ガウスの消去法はどんな正則行列に対しても適用できる汎用的なアルゴリズムであることがわかる。ただし、ここでは丸め誤差の影響は考慮していない。丸め誤差があると、元の係数行列が正則でも $a_{ik}^{(k)}$ ($i = k, \dots, n$) がすべて 0 になり、計算を進められなくなる場合が起こりうるので、注意が必要である。

9.4 LU 分解

行列形式で書いたガウスの消去法 いま、ピボット選択なしのガウスの消去法のアルゴリズムを見直してみる。第 k ステップの変形を行う直前の係数行列を $A^{(k)}$ 、右辺ベクトルを $\mathbf{b}^{(k)}$ と書く。第 k ステップでは、第 k 番目の方程式に $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ を掛けて第 i 番目の方程式 ($i = k + 1, \dots, n$) から引くが、これは行列 $A^{(k)}$ と右辺ベクトル $\mathbf{b}^{(k)}$ に次のような下三角行列 L_k を左から掛けていることに相当する。

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ 0 & 1 & & & & & & \\ 0 & 0 & \ddots & & & & & \\ \vdots & \vdots & & 1 & & & & \\ \vdots & \vdots & & -l_{k+1,k} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & -l_{k+2,k} & 0 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & 1 & \\ 0 & 0 & \cdots & -l_{nk} & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.21)$$

ここで、

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} \quad (i = k + 1, \dots, n) \quad (9.22)$$

である。 $A^{(k)}$ を要素で書いて実際に左から L_k を掛けると、それが消去演算になっていることがわかる（第 i 行について確認せよ）。したがって、

$$L_k A^{(k)} = A^{(k+1)} \quad (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad (9.23)$$

となる。

(9.23) 式を繰り返し使うと、 A の上三角行列 U への変形は、次のように A に $L_1, L_2, \dots, L_{n-1}$ を順に左から掛けていく操作と捉えることができる。

$$\begin{aligned} U &= A^{(n)} \\ &= L_{n-1} A^{(n-1)} \\ &= \dots \\ &= L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_2 L_1 A \end{aligned} \quad (9.24)$$

同様に、 $\mathbf{b}$ に対する変形も次のように書ける。

$$\begin{aligned} \mathbf{c} &= \mathbf{b}^{(n)} \\ &= L_{n-1} L_{n-1} \cdots L_2 L_1 \mathbf{b} \end{aligned} \quad (9.25)$$

これよりガウスの消去法で連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解く過程は次の3つの処理に分解できる。

- (1) (9.22) 式と (9.23) 式とを繰り返し順に使うことにより、 A を U に変形し、副産物として $L_1, L_2, \dots, L_{n-1}$ を得る処理
- (2) 得られた $L_1, L_2, \dots, L_{n-1}$ を使い、(9.25) 式より $\mathbf{c}$ を求める処理
- (3) $U\mathbf{x} = \mathbf{c}$ を解いて解 $\mathbf{x}$ を求める処理

(2) を **前進消去** と呼ぶ。また、先に述べたように、(3) を **後退代入** と呼ぶ。

右辺ベクトルのみが異なる方程式の解法 上記の3つの処理において、処理

(1) では係数行列 A のみを使い、右辺ベクトル $\mathbf{b}$ は使わない。したがって、方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解くために処理 (1), (2), (3) を実行した後、右辺ベクトルのみが異なる別の方程式 $A\mathbf{x}' = \mathbf{b}'$ を解きたい場合には、(1) で得られた $L_1, L_2, \dots, L_{n-1}$ と U とを再利用し、処理 (2), (3) のみを行えばよいことになる。

9.3 節で示したように、(1) の処理には約 $\frac{2}{3}n^3$ の計算量が必要なのに対し、(2), (3) の計算量はそれぞれ約 n^2 であるから、この方法を使うと、 $A\mathbf{x}' = \mathbf{b}'$ をはじめてから解く場合に比べ、計算量が大幅に節約できることになる。

応用例 以上の方法は、次のような場合に役立つ。

- 熱伝導方程式に対する陰的差分法。時刻 t_j での解 $\{u_{i,j}\}$ から時刻 t_{j+1} での解 $\{u_{i,j+1}\}$ を求めるには連立一次方程式 (7.24) を解く必要があるが、この連立一次方程式の係数行列は時間ステップに依存しない。したがって、(1) の処理を最初に 1 回行えば、それ以後の時間ステップでは (2), (3) の計算だけで済む。
- スプライン補間では、係数行列は標本点の間隔のみに依存する。したがって、同じ標本点を使って多くのデータを補間する場合、(1) の処理は 1 回のみで済む。
- ポアソン方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$ に対する差分法では、係数行列は計算格子のみに依存する。したがって、同じ格子を使って複数の $f(x, y)$ (たとえば複数の電荷分布) に対する方程式を解きたい場合、(1) の処理は 1 回でよい。

LU 分解 (以降の内容は授業ではやらなかったもので試験範囲からは除外します。)

(9.24) 式の両辺に $L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1$ を掛けると、

$$A = (L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1)^{-1}U \quad (9.26)$$

となる。ここで、下三角行列どうしの積は下三角行列であり、下三角行列の逆行列も下三角行列であること (証明せよ) を使うと、 $(L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1)^{-1}$ は下三角行列であることがわかる。そこで、これを L と書くと、

$$A = LU \quad (9.27)$$

となる。これを A の **LU 分解** と呼ぶ。さらに、この L は、(9.22) 式で与えられる l_{ik} を使って

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ l_{21} & 1 & & & & & \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & l_{k+1,k} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & l_{k+2,k} & l_{k+2,k+1} & \ddots & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & 1 \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk} & l_{n,k+1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} \quad (9.28)$$

と書けることもわかる。したがって、ガウスの消去法を行うと、 A の LU 分解が自動的に得られる。

LU 分解を求める方法は、実はガウスの消去法だけではなく、クラウト法、内積形式ガウス法¹などいろいろなアルゴリズムがある。しかし、 A が正則である場合には、 L の対角要素がすべて1であるという条件のもとで、 $A = LU$ を満たす下三角行列 L 、上三角行列 U は一意的に定まることが証明できる。

LU 分解が得られると、方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の解 $\mathbf{x}$ は、2つの方程式

$$L\mathbf{c} = \mathbf{b} \quad (9.29)$$

$$U\mathbf{x} = \mathbf{c} \quad (9.30)$$

を順に解くことによって得られる。(9.30) 式の解は代入計算によって簡単に求められることを 9.3 節で示したが、(9.29) 式の解も同様に代入計算のみによって簡単に求められる（実は (9.25) 式と同じ計算をしていることになる）。(9.30)、(9.29) をとくための計算量は共に約 n^2 であるから、 A の LU 分解を求めておけば、任意の右辺ベクトルに対する連立一次方程式を約 $2n^2$ の計算量で解くことができる。

9.5 特別な係数行列に対するガウスの消去法

前節までに述べた解法は係数行列 A が一般の正則行列の場合のアルゴリズムであるが、 A が 9.2 節で述べたような特殊な性質を持つ場合には、それを利用して計算量と計算に必要な記憶領域とを削減できる。ここでは、 A が帯行列の場合と対称行列の場合の2つについて、それらに適したガウスの消去法のアルゴリズムを説明する。なお、以下では簡単のため、ピボット選択は行わないと仮定する。

9.5.1 帯行列に対するガウスの消去法

帯行列に対するガウスの消去法の性質 いま、 A が半帯幅 b の帯行列 ($|i-j| > b$ のとき $a_{ij} = 0$) であるとする。このとき、第 k ステップ変形を行う直前の係数行列を $A^{(k)}$ とすると、第 (k, k) 要素を左上隅の要素とする $A^{(k)}$ の $(n-k+1) \times (n-k+1)$ 部分行列は、やはり半帯幅 b の帯行列である。これを帰納法により示す。

まず、 $k=1$ に対しては $A^{(1)} = A$ であるから、命題は正しい。次に、ある k に対して命題が正しいと仮定する。すると、第 k ステップの変形では、消去すべき第 k 行の要素は $a_{k+1,k}^{(k)}, \dots, a_{k+b,k}^{(k)}$ の b 個だけである（それより下の要素は帯の外だから最初から 0）から、消去対象の行は $k+1 \leq i \leq k+b$ の b 行だけである。また、消去では第 k 行の定数倍をこれらの行から引くが、第

¹たとえば小国力編著：「行列計算ソフトウェア - WS, スーパーコン並列計算機」, 丸善, 1991 を参照

k 行で 0 でない要素は $a_{kk}^{(k)}, a_{k,k+1}^{(k)}, \dots, a_{k,k+b}^{(k)}$ の $b+1$ 個だけであるから、消去に関わる列は $k \leq j \leq k+b$ の b 列だけである。したがって、第 k ステップでの消去により第 (i, j) 要素が影響を受けるのは

$$\begin{aligned} k+1 &\leq i \leq k+b \\ k &\leq j \leq k+b \end{aligned} \quad (9.31)$$

の場合だけであるが、これを満たす i, j については明らかに

$$-b+1 \leq i-j \leq b \quad (9.32)$$

が成り立つ。これより $|i-j| > b$ となるが、これはこの要素が帯の内側にあることを示す。したがって、消去により帯の外側に非零が増えることはなく、第 $(k+1, k+1)$ 要素を左上隅の要素とする $A^{(k+1)}$ の $(n-k) \times (n-k)$ 部分行列もやはり半帯幅 b の帯行列となる。したがって帰納法により、命題は $1 \leq \forall k \leq n$ について成り立つ。

計算量と記憶領域 上記の証明より、各ステップで消去に関わる行、列はそれぞれ b 行、 $b+1$ 列のみであるから、消去のための計算量は（掛け算と引き算を合わせて） $2b \times (b+1)$ となる。したがって、全体での計算量は約 $2b^2n$ 程度となる。また、消去によって帯の外の要素が新たに非零となることはないから、行列の記憶領域としては帯の内部の要素を記憶するための領域のみを持てばよい。したがって必要な記憶領域は約 $(2b+1)n$ となる。

応用例 101×101 の格子上でポアソン方程式のディリクレ型境界値問題を解く場合を考える。すると、未知数は $100 \times 100 = 10^4$ 個で、 10^4 元の連立一次方程式を解くことになる。これを密行列として扱うと、係数行列 A を上三角行列に変形するための計算量は

$$\frac{2}{3} \times (10^4)^3 = \frac{2}{3} \times 10^{12} \quad (9.33)$$

と膨大になる。

一方、9.2 節で述べたように、行列 A は（未知数に適当な順序を付けることにより）半帯幅 100 の帯行列となる。これを本節で説明した帯行列用の解法で扱うと、上三角行列への変形の計算量は

$$2 \times 100^2 \times 10^4 = 2 \times 10^8 \quad (9.34)$$

となる。これは密行列として扱った場合に比べ、計算量が約 3300 倍も少なくて済むことになる。このような大規模問題を扱う場合、係数行列の性質を最大限に利用して計算量をできるだけ削減することは必須である。

9.5.2 対称行列に対するガウスの消去法

対称行列に対するガウスの消去法の性質 もう一つの例として、行列 A が対称行列、すなわち $a_{ij} = a_{ji}$ である場合を考える。このとき、 $A^{(k)}$ において、第 (k, k) 要素を左上隅の要素とする $(n - k + 1) \times (n - k + 1)$ 部分行列は対称行列である。これを帰納法により示す。

まず、 $k = 1$ に対しては $A^{(1)} = A$ であるから、命題は正しい。次に、ある k に対して命題が正しいと仮定する。いま、第 k ステップの変形では第 k 行の $a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$ 倍を第 i 行から引くが、これを成分で書くと、

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{kj}^{(k)} \quad (i, j = k + 1, \dots, n) \quad (9.35)$$

となる。ここで、 $a_{ij}^{(k)} = a_{ji}^{(k)}$ ($i, j = k, \dots, n$) を使って上式を変形すると、

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ji}^{(k)} - \frac{a_{ki}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{jk}^{(k)} \\ &= a_{ji}^{(k)} - \frac{a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{ki}^{(k)} \\ &= a_{ji}^{(k+1)} \end{aligned} \quad (9.36)$$

となる。したがって、命題は $k + 1$ についても成り立つ。よって帰納法により命題は $1 \leq \forall k \leq n$ について成り立つ。

計算量と記憶領域 上記の命題より、対称行列に対するガウスの消去法では、行列 $A^{(k)}$ の上三角部分のみを記憶し、計算を行えばよい。計算のために下三角部分の要素 $a_{ji}^{(k)}$ が必要な場合は、これを $a_{ij}^{(k)}$ で代用する。これにより、計算量と計算に必要な記憶領域は半分に削減できる。

第9章の問題

問題1

次の連立一次方程式をガウスの消去法により解け。ただし、(2) では必要ならばピボット選択を行うこと。

(1)

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 \\ 24 \\ 31 \end{pmatrix}$$

(2)

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 8 & 5 \\ 3 & 6 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30 \\ 33 \\ 45 \end{pmatrix}$$

問題2

ポアソン方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$ の差分法による求解を考える。ただし、領域は $[0, 1]^2$ とし、境界条件は全境界で $u(x, y) = 0$ と与えられているものとする。また、 x 方向、 y 方向の格子点数をそれぞれ（境界を入れて） N とし、2階微分の近似には中心差分を使うとする。

- (1) 格子点 $(x_i, y_j) = (\frac{i}{N}, \frac{j}{N})$ ($0 < i, j < N$) における差分近似の式を求めよ。ただし、 (x_i, y_j) における u の値を u_{ij} と書いてよい。
- (2) $N = 5$ のとき、差分近似により得られる連立一次方程式 $A\mathbf{u} = \mathbf{f}$ の係数行列 A の形を具体的に書け。ただし、未知数は $u_{11}, u_{12}, u_{13}, u_{21}, \dots, u_{33}$ の順に並んでいるとする。
- (3) 上記 (2) の結果から推論して、一般にこの問題での係数行列はどのような性質を持っていると考えられるか。考えられる限り述べよ。
- (4) 方程式 $A\mathbf{u} = \mathbf{f}$ をガウスの消去法で解く場合、上記 (3) の性質を使うと計算量はどれだけになるか。四則演算をそれぞれ1回と数え、 N の関数として述べよ。ただし、最高次の項だけを考えればよい。