Gauss の消去法の安定性について

渡部善隆 (九州大学大型計算機センター)

Slide 1

数値計算法の流れ

自然現象や社会現象

⇓ 数学の言葉でモデル化

微分方程式 / 積分方程式 (連続系・無限次元)

⇓ 定式化，離散化

近似モデル (離散系・有限次元)

⇓ 線形化

計算アルゴリズム

⇓ プログラミング ★

数値結果

⇓ 可視化，誤差解析

Graphics, 連続系への反映

Slide 2

連立 1 次方程式の数値解法

問題

正則な行列 A，ベクトル b に対し，

$$Ax = b$$

を満たす x の近似解 $\hat{x}$ を，適当な精度で，かつ少ない記憶容量で，しかもできるだけ速く求めよ．

1. 直接法 (direct method) ★
2. 反復法 (iterative method)
3. 共役勾配法 (conjugate gradient method)
4. 各方法の組み合わせ

直接法

$A,\ b \longrightarrow$ 有限回の演算 $\longrightarrow x$

- もしも丸めの誤差がなければ有限回の演算で厳密な解が得られる解法．
- 演算回数は計算する前から (ほぼ) 決まっている．つまり計算時間が同じ．

【利点】
行列が密行列であったり，都合のいい性質を持つかどうかわからない得体の知れないものであっても，計算が失敗しない限り，とりあえず解を出してくれる．

【弱点】
行列が疎行列であっても “0 が多い” という利点を生かしにくく，計算機の記憶容量が反復法に比べたくさん必要．演算回数は普通次数 n の 3 乗に比例．

直接法の分類

1. Cramer の公式
2. Hamilton-Cayley の定理に基礎をおく方法
3. 三角化に基礎をおく方法
   — Gauss の消去法 ★, Crout 法, (修正)Cholesky 法, Bunch の方法, etc.
4. 対角化に基礎をおく方法
   — Gauss-Jordan の消去法, 逆行列の積表現, 合同変換による方法
5. 直交化法
   — 直交ベクトル法, 直交行列法 (QR 分解)
6. 分割法
   — 分割計算法, 縁どり法, エスカレータ法, 階数零化法
7. 三重対角行列専用の方法
   — Gauss の消去法, Cholesky 法, cyclic reduction 法
8. 疎行列, 帯行列専用の方法
   — wavefront 法, スカイライン法, DM 分解に基づく方法

分解定理

LU 定理

A が正則ならば, 適当な置換行列 P を用いて

$$PA = LU$$

の形に分解できる. また, L の対角要素が 1 のとき, 分解は一意に定まる.

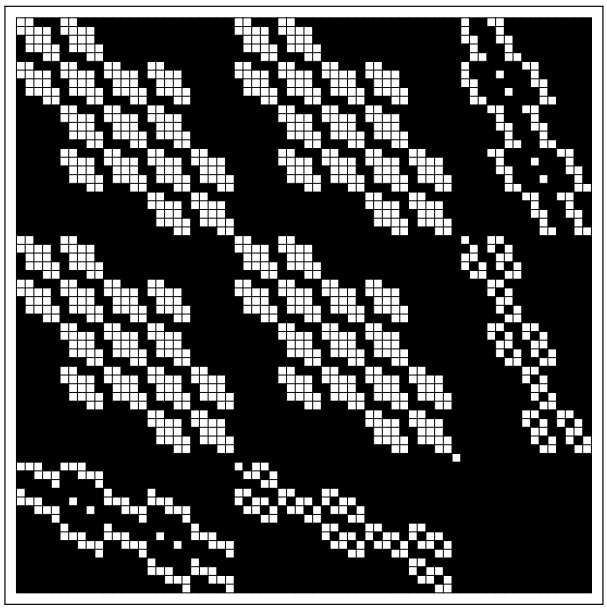
QR 分解

A が正則ならば, 直交行列 Q と上三角行列 R が存在して

$$A = QR$$

の形に分解できる. また, 分解は R の対角成分をすべて正になるように定めれば一意である.

LU 分解による行列の変化 I

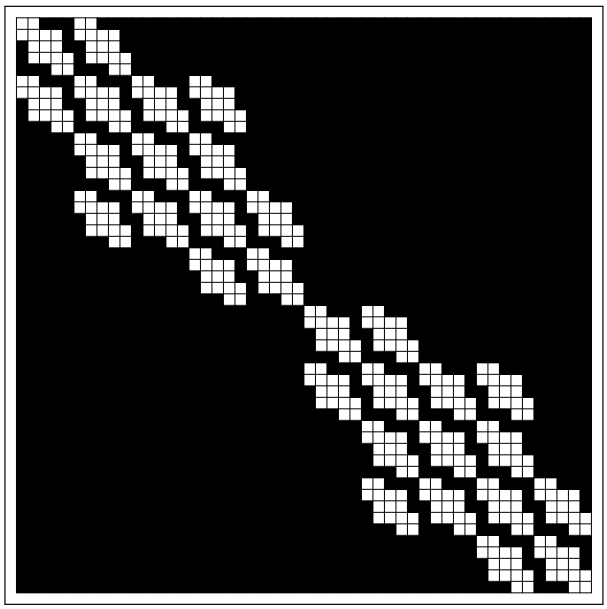


分解前

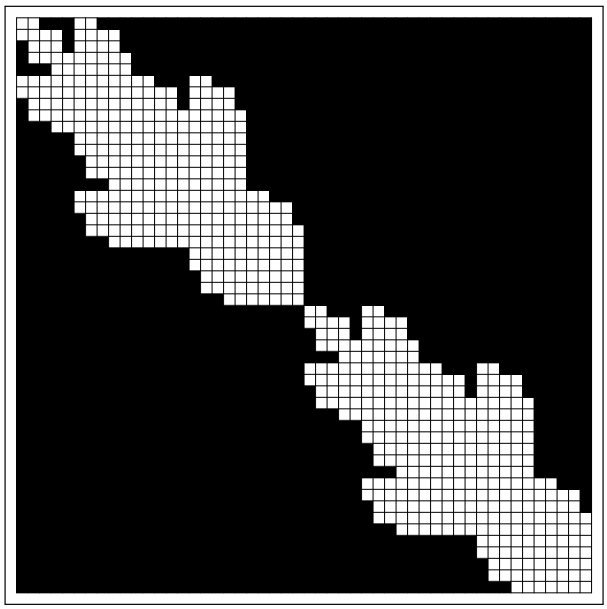
分解後

Slide 7

LU 分解による行列の変化 II



分解前



分解後

Slide 8

反復法

$$x^0 \to x^1 \to x^2 \to \cdots \to x$$

適当に選んだ初期値から出発して，真の解に収束していく近似解の列を逐次作成していく手法．

反復の各段階では、それまでに得られた近似解の情報を駆使し，より良い近似解を生成する工夫が施されている．

【利点】
行列が 0 でない部分を格納する記憶領域があれば可能．

プログラムが簡単に書ける．

【弱点】
理屈の上では無限解の反復をしない限り厳密解を得ることはできない．そのため，適当なところで反復を打ち切る必要がある，

実際に計算をやってみないと演算回数はわからない．

反復法の分類

線形定常反復法

適当な初期値 x^0 から出発して,

$$x^k = x^{k-1} + R(b - Ax^{k-1}), \quad k \geq 1$$

を気がすむまで繰り返す. ただし R は A^{-1} の近似であることが望ましい.

$A = L + D + U$　(L と U の対角成分は 0)

有名な方法	R の決め方	収束条件
Jacobi 法	$R = D^{-1}$	A が優対角行列
Richardson 法	$R = \alpha A^T$	?
Gauss-Seidel 法	$R = (L + D)^{-1}$	A が優対角行列 or 対称・正定値行列
SOR 法	$R = (L + \omega^{-1}D)^{-1}$	A が対称・正定値かつ $D + \omega L$ が正則

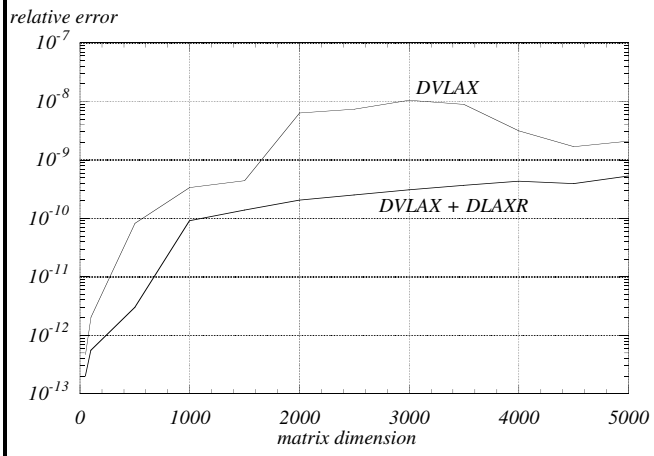
Slide 10

直接法の反復改良

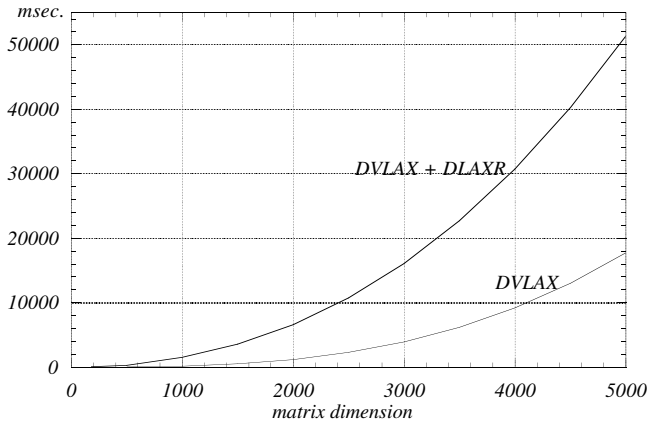
直接法で分解した行列 LU, LDU, LDL^T, LL^T, MDM^T, QR を R , 近似解 $\hat{x}$ を初期値として反復法を行う .

$$R = (LU)^{-1}$$

$$x^k = x^{k-1} + (LU)^{-1}(b - Ax^{k-1}), \quad x^0 = \hat{x}$$



直接法の反復改良 (精度)



直接法の反復改良 (実行時間)

FUJITSU VP2600/10, SSL II/VP

Slide 11

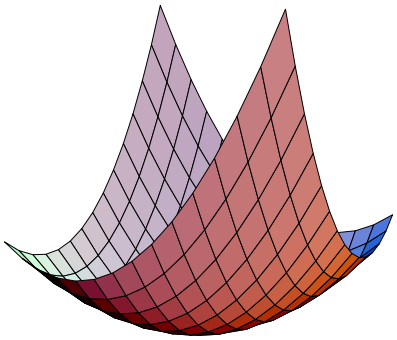
共役勾配法

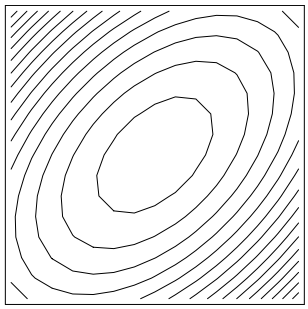
原理的には丸めの誤差がなければ高々 n 回の反復で厳密解が得られる．そのため，直接法の一種といえる．

$$x^0 \to x^1 \to \cdots \to x^n = x$$

が、実際は丸め誤差のためそうはいかず，欲しい精度になるまで反復を続ける．従って，反復解法に分類されることもある．

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad (C^{-1}AC^{-T})(C^T x) = C^{-1}b \quad \Leftrightarrow \quad \min_x f(x)$$





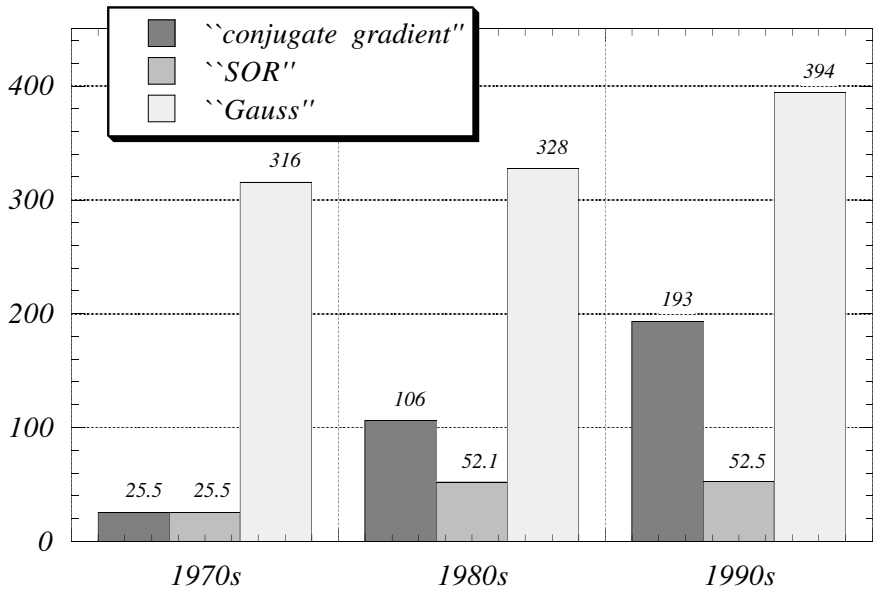
略語	英語名	日本名
SD 法	steepest descent method	最急降下法
CD 法	conjugate direction method	共役方向法
CG 法	conjugate gradient method	共役勾配法
PCG 法	preconditioned conjugate gradient method	前処理付き共役勾配法
ICCG 法	imcomplete Cholesky conjugate gradient method	不完全 Cholesky 分解付き共役勾配法
MICCG 法	modified imcomplete Cholesky conjugate gradient method	修正不完全 Cholesky 分解付き共役勾配法
CR 法	conjugate residual method	共役残差法
PCR 法	preconditioned conjugate residual method	前処理付き共役残差法
ILUCR 法	incomplete LU conjugate residual method	不完全 LU 分解付き共役残差法
MILUCR 法	modified incomplete LU conjugate residual method	修正不完全 LU 分解付き共役残差法
BCG 法	biconjugate gradient method	双対共役勾配法
PBCG 法	preconditioned biconjugate gradient method	前処理付き双対共役勾配法
ILUBCG 法	incomplete LU biconjugate gradient method	不完全 LU 分解付き双対共役勾配法
MILUBCG 法	modified incomplete LU biconjugate gradient method	修正不完全 LU 分解付き双対共役勾配法
CGS 法	conjugate gradient squared method	自乗共役勾配法
PCGS 法	preconditioned conjugate gradient squared method	前処理付き自乗共役勾配法
ILUCGS 法	incomplete LU conjugate gradient squared method	不完全 LU 分解付き自乗共役勾配法
MILUCGS 法	modified incomplete LU conjugate gradient squared method	修正不完全 LU 分解付き自乗共役勾配法
QMR 法	quasi-minimal residual method	準最小残差法 *
MINRES 法	minimal residual method	最小残差法 *
GMRES 法	generalized minimal residual method	一般化最小残差法 *
BiCGStab 法	biconjugate gradient stabilized method*	双対共役勾配安定化法 *

【注意】* は一般的な呼び方がわからなかったので適当に命名．

“M” は “modified” の M，
“IC” は “imcomplete Cholesky” の “IC”，
“ILU” は “imcomplete LU” の “ILU”，
“P” は “preconditioned” の “P”

INSPEC のヒット数

INSPEC : 1969 年以降の物理，電気・電子工学，計算機科学，制御工学，情報工学関係の文献のデータベース．



INSPEC のヒット件数の推移 (100 万件あたり)

Slide 13

サブルーチンライブラリ

行列の形	ベクトル計算機	並列ベクトル計算機
一般の行列	Gauss の消去法での LU 分解 Crout 法での LU 分解 Householder 変換による QR 分解 特異値分解法による最小二乗解	Gauss の消去法での LU 分解 修正 Gram-Schmidt 法による 最小二乗解
疎		修正一般化共役残差法 (MGCR 法)
対称	Bunch の方法での MDM^T 分解	
帯	Gauss の消去法での LU 分解	Gauss の消去法での LU 分解
三重対角	Gauss の消去法での LU 分解 cyclic reduction 法	
対称・帯	Bunch の方法での MDM^T 分解	
正定値・対称	修正 Cholesky 法での LDL^T 分解	修正 Cholesky 法での LDL^T 分解
正定値・対称・疎		前処理付き共役勾配法 (PCG 法)
正定値・対称・帯	修正 Cholesky 法での LDL^T 分解	修正 Cholesky 法での LDL^T 分解
正定値・対称・三重対角	修正 Cholesky 法での LDL^T 分解	

Slide 14

Gauss の消去法のアルゴリズム

$k = 1, 2, \cdots n$ に対し

$$m_i^{(k)} = a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)},$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - m_i^{(k)} a_{kj}^{(k-1)},$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - m_i^{(k)} b_k^{(k-1)}, \quad i \geq k+1,\ j \geq k+1$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \cdots & \vdots \\ 0 & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

消去の段階の $a_{kk}^{(k-1)}$ をピボット $(pivot)$，$m_i^{(k)}$ を乗数 $(multipliers)$ と呼ぶ．

$$x_k = \left(b_k^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k-1)} x_j \right) / a_{kk}^{(k-1)}$$

Slide 15

Gauss の消去法と LU 分解との関係

LU 分解は Gauss の消去法の計算で既に完了している．

$$L = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \cdots & \vdots \\ 0 & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ m_2^{(1)} & 1 & & 0 \\ m_3^{(1)} & m_3^{(2)} & 1 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \\ m_n^{(1)} & m_n^{(2)} & \cdots & m_n^{(n-1)} \quad 1 \end{pmatrix}$$

同じ A に対して何度も違う b を使って計算する場合，行列 A を LU 分解し，そのあとで三角行列 L と U を用いて b を変形するプログラムの方が使い勝手がいい．

- $A = LU$　　LU 分解
- $Lz = b$　　前進代入
- $Ux = z$　　後退代入

$\Rightarrow$ Gauss の消去法と LU 分解法を同じものとして扱う場合もある．

部分ピボット選択法

ピボットの絶対値が小さい場合，浮動小数点演算で次の段階に進めない可能性がある．また，$|m_i^{(k)}|$ を小さく，つまり $|a_{kk}^{(k-1)}|$ を大きく選択するほうが，一般に $a_{ij}^{(k-1)}$ の情報を生かすことができる．

$\Longrightarrow$　数値的に最良のピボット $a_{kk}^{(k-1)}$ を探すには？

partial pivoting strategy

$\max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k-1)}|$ がピボットとなるように行を入れ換えてから，次の段階の消去を行なう．

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & \boxed{a_{22}^{(1)}} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \boxed{\vdots} & \cdots & \vdots \\ 0 & \boxed{a_{n2}^{(1)}} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

部分ピボット選択の対象となる成分 (2 段目)

Slide 17

完全ピボット選択法

complete pivoting strategy

$\max_{k \le i,j \le n} |a_{ij}^{(k-1)}|$ がピボットとなるように行と列を入れ換えてから，次の段階の消去を行なう．

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

完全ピボット選択の対象となる成分 (2 段目)

ピボット選択のために必要な比較の回数：

部分選択	$n(n+1)/2$ 回
完全選択	$n(n+1)(2n+1)/6$ 回

Slide 18

スケーリング

ピボット選択は，各行列成分の絶対値の大きさがだいたい同じ程度であれば丸め誤差の増大を抑える効果がある．そこで，消去法に入る前に各要素の絶対値の大きさがだいたい同じ程度になるように調整し，ピボット選択に意味を持たせる．

【部分ピボット選択の場合】
$i = 1, \cdots, n$ に対し，i 行の成分の絶対値最大

$$\alpha_i = \max_{1 \le j \le n} |a_{ij}|$$

でもって，

$$a^*_{ij} = a_{ij}/\alpha_i, \quad j = 1, \cdots, n$$

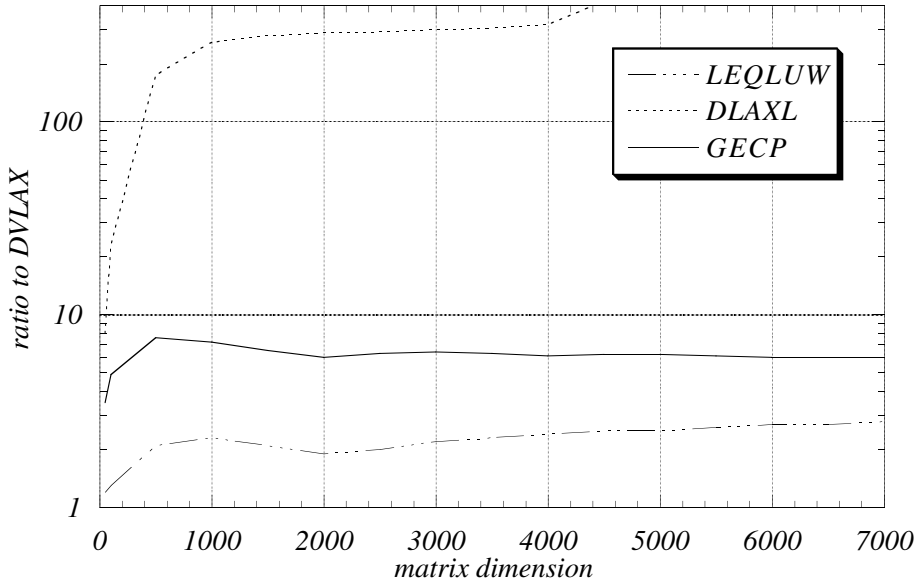
$$b^*_i = b_i/\alpha_i$$

と操作．この結果，すべての係数が絶対値 1 以下となり，少なくとも 1 つは絶対値 1 の係数がどこかにある行列になる．

完全ピボット選択の場合は，式だけでなく列のバランスもとる必要がある．

Slide 19

直接法の速度比較



DVLAX	Gauss の消去法 (部分ピボット選択)
LEQLUW	Crout 法 (部分ピボット選択)
DLAXL	Householder 変換による QR 分解
GECP	Gauss の消去法 (完全ピボット選択)

Slide 20

消去法の歴史

紀元前 **2** 世紀 :『九章算術』の第 8 章「方程」にガウスの消去法とまったく同じアルゴリズムの記述がある .

18 世紀後半 : Joseph Louis Lagrange(1736–1813), 斉次な系を解くための消去法のアイデアをほのめかす .

1809 年 : Carl Friedrich Gauss(1777–1855),『天体運動論』で消去法を紹介 .

1823 年 : Gauss, 弟子の Christian Ludwig Gerling さんにあてた手紙で, 連立 1 次方程式を解くためには直接法ではなく反復法を使うことを推奨 .

> *You will hardly ever again eliminate directly, at least not when you have more than 2 unknowns. The indirect procedure can be done while one is half asleep, or while thinking about other things.*
>
> Gauss さんから Gerling さんへの手紙 (1823)

Slide 21

電子計算機と Gauss の消去法

1940 年代： 電子計算機が本格的な実用段階に入り，Gauss の消去法と丸め誤差の研究が盛んになる．

1943 年： Hotelling，$A^TAx = b$ の形をした $n \times n$ 方程式の解において，誤差は 4^{n-1} 程度になるであろうと予言．

当初の研究での結論は，100 個程度の未知数を持つ方程式系を解く場合でも，不可能なほどの多くの有効桁を保って演算しない限り必要な精度はとても得られまい，というものだった．

⇒ 反復法の天下

1947 年： von Neumann & Goldstein，正定値対称行列の場合，丸め誤差の影響は，それまで考えられていたほど大きくないことを示す．

1961 年： James Hardy Wilkinson(1919–1986)，後退誤差解析により，Gauss の消去法によって発生する浮動小数点演算の誤差を評価．

Slide 22

Gauss の消去法の誤差評価

Wilkinson の定理

連立 1 次方程式を Gauss の消去法で求めたときの相対誤差は

$$\frac{||\hat{x} - x||_\infty}{||x||_\infty} \leq 4n^2 \cdot \kappa_\infty(A) \cdot \rho \cdot \varepsilon_M .$$

- $||x||_\infty = \max_i |x_i|$
- $\kappa_\infty(A) = ||A||_\infty ||A^{-1}||_\infty$　：行列 A の条件数 $(condition\ number)$
- $||A||_\infty = \max_i \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$
- $\varepsilon_M = c\beta^{1-t}$　：マシンイプシロン (IEEE 倍精度でおよそ 1.11×10^{-16})
- $\rho = \dfrac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}$　：三角行列化における不安定因子 $(growth\ factor)$

Slide 23

不安定因子の上限

ρ の上限 (Wilkinson)

- 部分ピボット選択を用いたとき

  $\rho \leq 2^{n-1}$ ★

- 完全ピボット選択を用いたとき

  $$\begin{aligned} \rho \leq & \quad n^{1/2}(2^1 3^{1/2} 4^{1/3} \cdots n^{1/(n-1)})^{1/2} \\ \leq & \quad 1.8n^{1/4 \log n} \qquad (\rho \leq n \text{ の予想がある}) \end{aligned}$$

- 対称正定値行列のとき (ピボット選択なし)

  $\rho \leq 1$

- 対角優位行列のとき (ピボット選択なし)

  $\rho \leq 2$

- Hessenberg 行列に部分ピボット選択を用いたとき

  $\rho \leq n$

Slide 24

上限を与える行列の例 (Wilkinson)

n 次行列を A_n とする．$k = 1, 2, \cdots, n-1$ に対し，A_n の第 k 列を

- 上から $k-1$ 番目までが 0
- そのあとに $1, 1, -1, 1, -1, 1, \cdots$ が続く
- 最後の列だけは $-1, 1, -1, \cdots$

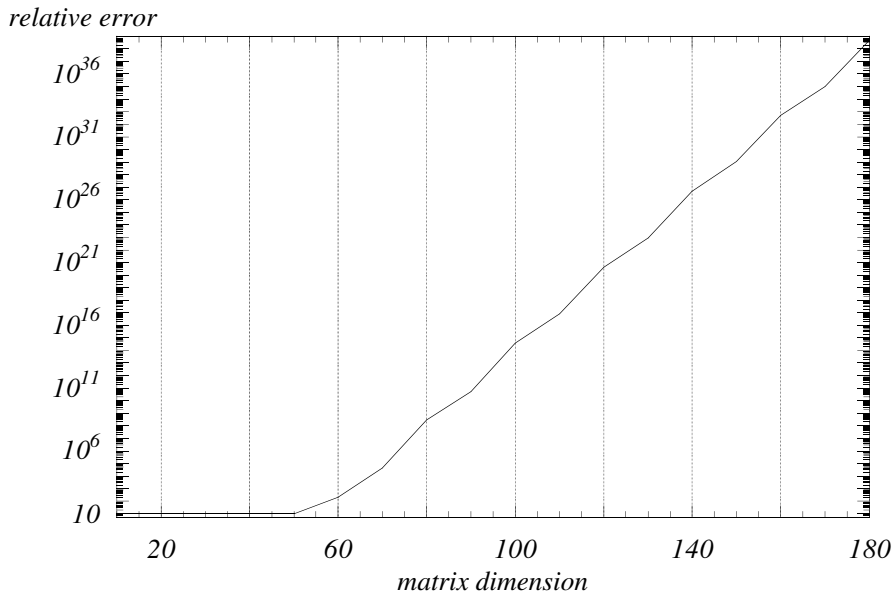
として作成．

$$A_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \overset{\text{消去}}{\Longrightarrow} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ & 1 & 0 & 0 & 2 \\ & & 1 & 0 & -4 \\ & 0 & & 1 & 8 \\ & & & & -16 \end{pmatrix}$$

・部分ピボット選択では行の変換が起きない．U の右下成分は $(-1)^n 2^{n-1}$ ．

・完全ピボット選択ではピボットが変化し不安定因子は常に 2 以下に抑えられる．

Slide 25



不安定因子が $\rho = 2^{n-1}$ の場合の解の振舞い

n	a_{nn}
56	36028797018963968
57	72057594037927936
58	144115188075855870
59	288230376151711740

Slide 26

Gauss の消去法の謎

部分ピボット選択の Gauss の消去法は、条件数がよい場合でも不安定となる場合がある。

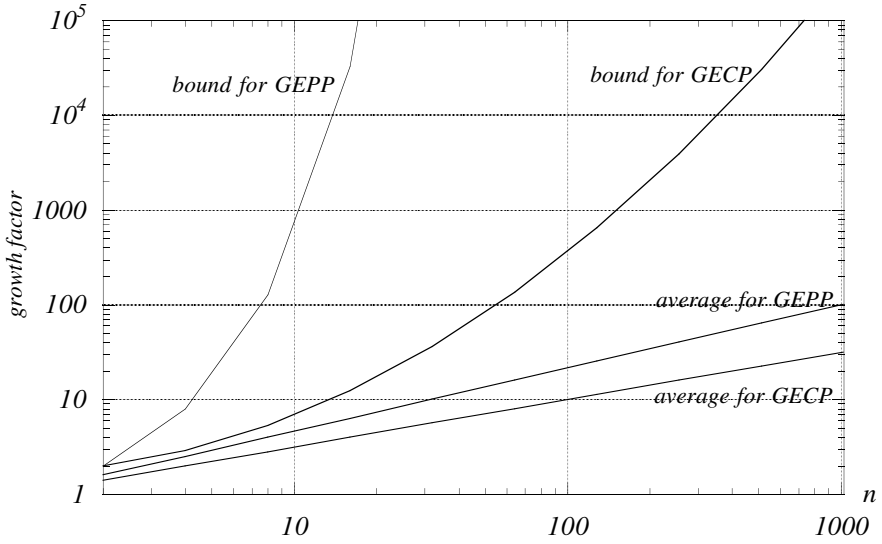
が、ピボットの完全選択，QR 分解法 $(\rho \leq n^{1/2})$ は部分ピボット選択に比べはるかに実行コストがかかる上に，“経験的に” 部分選択法でも安定な結果が得られている．

> 行列の計算にとり組んできた人々が過去 15 ないし 20 年間に知った唯一のしかもきわめて重要なことは、次の事実であろう。ピボットの部分的選択を行う Gauss 消去法では残差が小さいことが保証される。
>
> G. E. Forsythe, M. A. Malcolm and C. B. Moler (1977) 『計算機のための数値計算法』

Slide 27

Trefethen の実験

次数が 1024 以下の行列に対し，適当な乱数を発生させて作った random matrix で Gauss の消去法を片っぱしから解き，不安定因子の平均値を算定．



部分ピボット選択のとき　$\rho \approx n^{2/3}$

完全ピボット選択のとき　$\rho \approx n^{1/2}$

Slide 28

部分ピボット選択が失敗する例 (Wright)

$\mathbb{R}^n$ の 2 点境界値問題

$$y' = M(t)y + q(t), \quad y(a) = y(b) = \beta$$

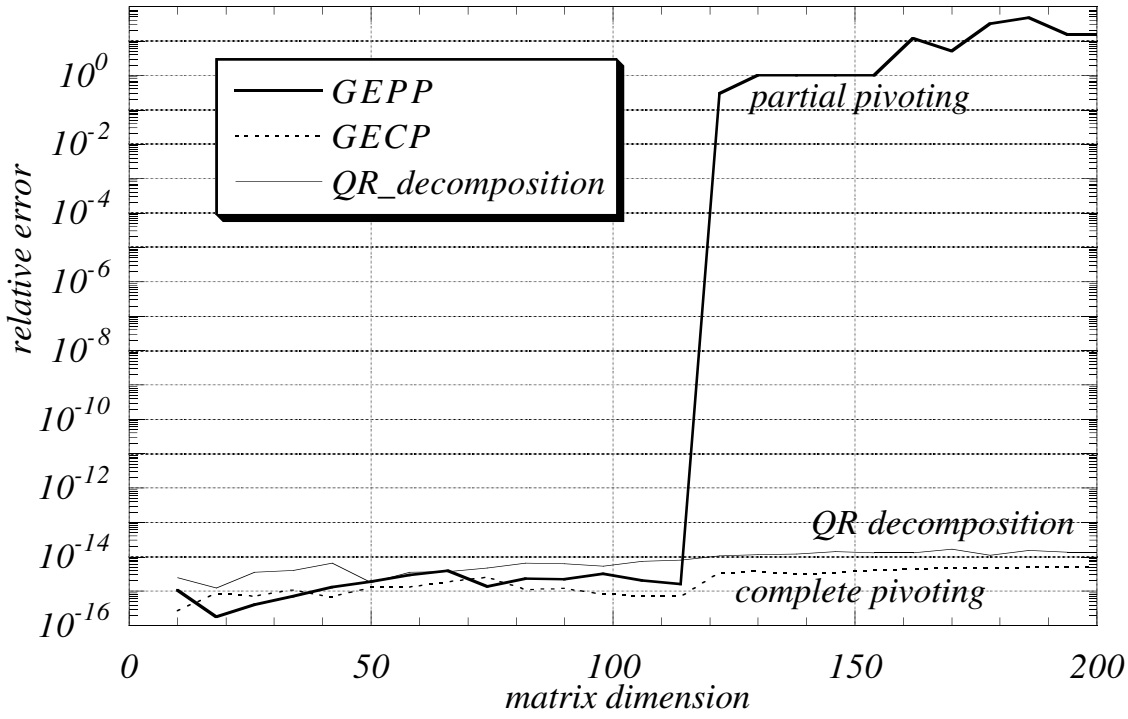
を $y(t) \in \mathbb{R}^n$ について解く．$M(t)$ は t についての $n \times n$ の関数行列，$q(t)$ は既知ベクトル．標準的な shooting method を適用し離散化すると．

$$A = \begin{pmatrix} I & & & & I \\ -e^{Mh} & I & & & 0 \\ & -e^{Mh} & I & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & -e^{Mh} & I \end{pmatrix}$$

I は 2 次の単位行列，h は区間 $[a, b]$ の分割幅，

$$-e^{Mh} = I + Mh + O(h^2) \approx \begin{pmatrix} h/6 - 1 & -h \\ -h & h/6 - 1 \end{pmatrix}$$

Slide 29


GEPP
GECP
QR_decomposition
partial pivoting
QR decomposition
complete pivoting
relative error
10^{0}
10^{-2}
10^{-4}
10^{-6}
10^{-8}
10^{-10}
10^{-12}
10^{-14}
10^{-16}
0
50
100
150
200
matrix dimension

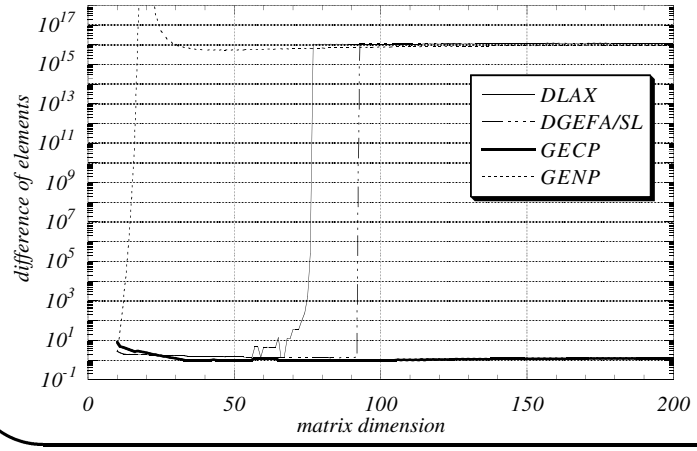
Slide 30

部分ピボット選択が失敗する例 (Foster)

2 階の線形 Volterra 型積分方程式から導かれる

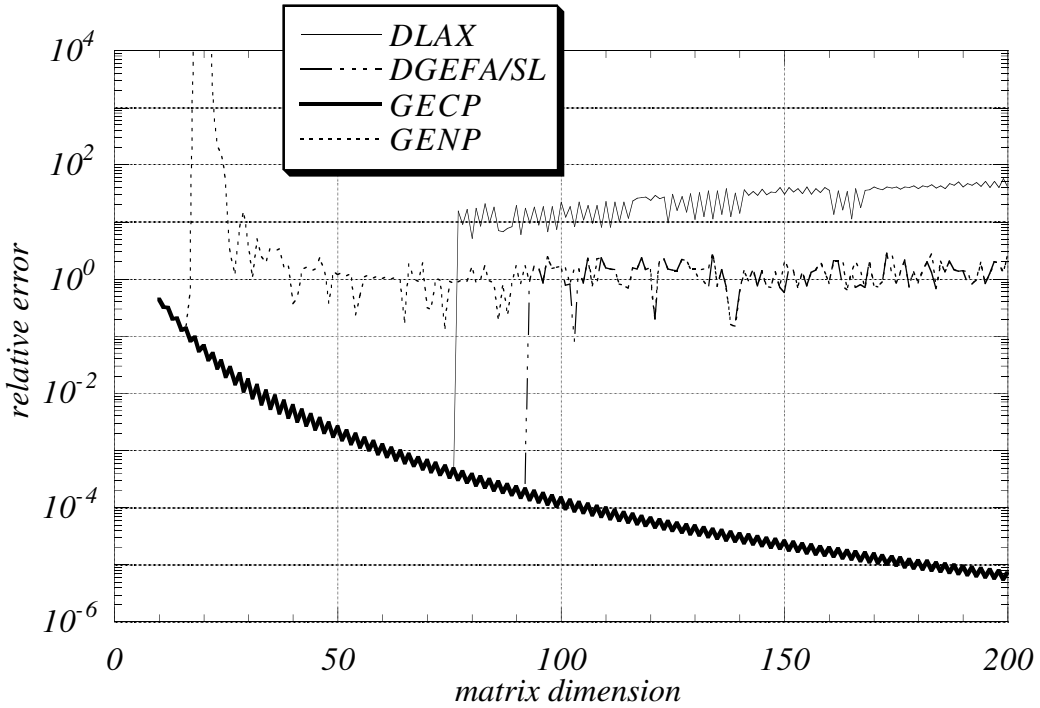
$$x(s) - \int_0^s k(s,t)x(t)\,dt + \beta(s)x(L) = G(s)$$

の区間 $[0, L]$ 上の $x(s)$ を一般的な求積法で近似する．積分近似は Newton-Cotes 公式と Simpson の公式を組み合わせて用いる．



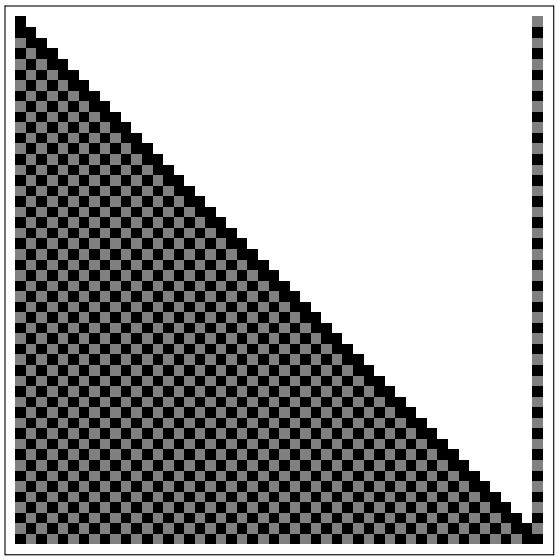
行列 A は悪条件ではないが，部分ピボット選択による LU 分解をすると，ある n 以上ではピボット選択をしなくなり，不安定因子が急激に増大する．

Slide 31

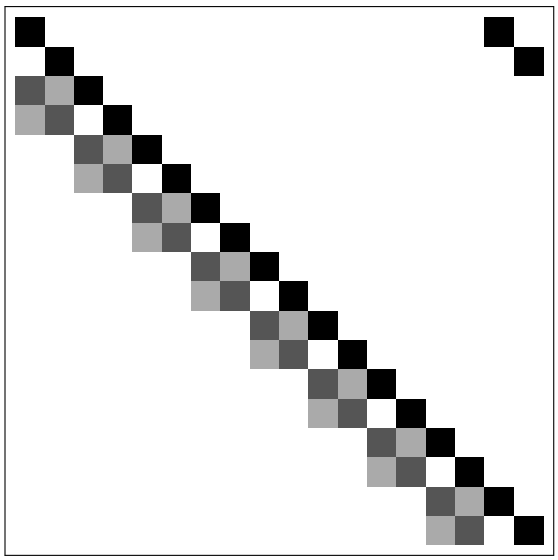


DLAX	部分ピボット選択付き LU 分解
DGEFA/SL	部分ピボット選択付き LU 分解 (LINPACK)
GENP	スケーリングもピボット選択もしない Gauss の消去法
GECP	完全ピボット選択

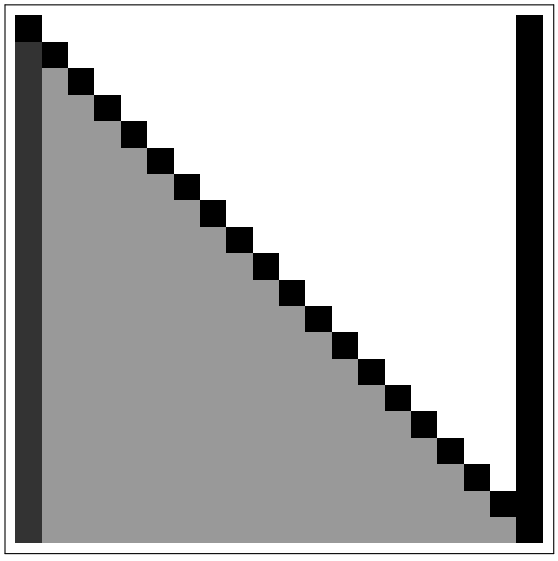
Slide 32



Wilkinson の行列



Wright の行列



Foster の行列