数値解析第10回 線形計算の計算量

1．計算量の単位

ある計算が計算機に与える計算負荷を計算量という．

浮動小数計算では，計算量を浮動小数乗除算の回数で計る．単位はflopである．

△ **flop**(floating operation)：浮動小数**乗算**あるいは浮動小数**除算**1回の計算量．//

加減算は乗除算より計算負荷が小さいので無視する．また，線形計算では加減算と乗除算の回数はほぼ等しくなることが多いので，計算負荷を比較するにはflopを数えれば十分．

計算時間には，浮動小数演算に加え，固定小数演算，メモリーアクセスなどに掛かった時間が関わる．同種のアルゴリズムではそれらの比率はほぼ一定なので，計算時間はflopsにほぼ比例する．flopsが半分なら，計算時間もほぼ半分とみて良い．

［**例1**］ $a+b$ (0flops)， ab (1flop)， a/b (1flop)， $ab+c/d$ (2flops)， b^2-4ac (3flops)．//

2．基本的な線形計算の計算量

<1> ベクトルのスカラ倍： $\boldsymbol{y}=a\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$

アルゴリズム： $y_i=ax_i\ (1\le i\le n)$， 計算量： n flops

<2> ベクトルの内積： $s=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y},\ \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$

アルゴリズム： $s=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i$， 計算量： n flops

<3> 線形変換： $\boldsymbol{y}=A\boldsymbol{x},\ A\in\mathbb{R}^{m\times n},\ \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$

アルゴリズム： $y_i=\underbrace{\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j}_{n\text{ flops}}\ (1\le i\le m)$， 計算量： mn flops

<4> 行列積： $\overset{l\times n}{C}=\overset{l\times m}{A}\ \overset{m\times n}{B}$

アルゴリズム： $c_{ij}=\underbrace{\sum_{k=1}^{m}a_{ik}b_{kj}}_{m\text{ flops}}\ (1\le i\le l,1\le j\le n)$， 計算量： lmn flops

<1>〜<3> は<4>に帰着する．<1> $\overset{n\times 1}{\boldsymbol{y}}=a\overset{n\times 1}{\boldsymbol{x}}=\overset{n\times 1}{\boldsymbol{x}}\ \overset{1\times 1}{a}$ の計算量は $n\times 1\times 1=n$ flops，<2> $\overset{1\times 1}{s}=\overset{1\times n}{\boldsymbol{x}^T}\ \overset{n\times 1}{\boldsymbol{y}}$ の計算量は $1\times n\times 1=n$ flops，<3> $\overset{m\times 1}{\boldsymbol{y}}=\overset{m\times n}{A}\ \overset{n\times 1}{\boldsymbol{x}}$ の計算量は $m\times n\times 1=mn$ flops．

［**例2**］問題の規模 l,m,n と計算量の関係を示す．計算時間はほぼ計算量に比例する．

	<1>	<2>	<3>	<4>
$l=m=n=10^2$	10^2 flops	10^2 flops	10^4 flops	10^6 flops
$l=m=n=2\times10^2$	2×10^2 flops	2×10^2 flops	4×10^4 flops	8×10^6 flops

3．三角行列

△ **下三角行列**(したさんかくぎょうれつ)： $A=\begin{pmatrix} a_{11} & & & O \\ a_{21} & a_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$, $a_{ij}=0\,(i<j)$．//

△ **上三角行列**(うえさんかくぎょうれつ)： $A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ O & & & a_{nn} \end{pmatrix}$, $a_{ij}=0\,(i>j)$．//

★1 下三角行列 $\overset{n\times n}{A}$ について，線形変換 $\boldsymbol{y}=A\boldsymbol{x}$ の計算量は $\frac{1}{2}n(n+1)=\frac{1}{2}n^2+O(n)$ flops．//

（説明） $a_{ij}=0\,(i<j)$ だから， $y_i=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j=\sum_{j=1}^{i}a_{ij}x_j+\sum_{j=i+1}^{n}\underbrace{a_{ij}}_{0}x_j=\sum_{j=1}^{i}a_{ij}x_j$ の計算量は i flops．全ての

$y_1,y_2,\cdots,y_n$ を計算するには $1+2+\cdots+n=\frac{1}{2}n(n+1)$ flops．//

★2 正則下三角行列 $\overset{n\times n}{A}$ について，線形変換 $\boldsymbol{y}=A^{-1}\boldsymbol{x}$ の計算量は $\frac{1}{2}n(n+1)=\frac{1}{2}n^2+O(n)$ flops．//

（説明）ベクトル $\boldsymbol{y}=A^{-1}\boldsymbol{x}$ は方程式 $A\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}$ の解である．両辺の第 i 成分は， A が下三角ゆえ，

$x_i=\sum_{j=1}^{i}a_{ij}y_j$．これを y_i について解くと $y_i=\left(x_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}y_j\right)/a_{ii}$．この式は， $y_1,\cdots,y_{i-1}$ が既に計算済みなら

y_i が計算できることを示す．以上より次のアルゴリズムを得る．

◎**前進代入法**： $y_i=\underbrace{\left(x_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}y_j\right)/a_{ii}}_{i\text{ flops}}$ $(i=1,2,\cdots,n)$ ：計算量 $\frac{1}{2}n(n+1)=\frac{1}{2}n^2+O(n)$ flops．//

上三角行列についても同様．

★3上三角行列 $\overset{n\times n}{A}$ について，線形変換 $\boldsymbol{y}=A\boldsymbol{x}$ の計算量は $\frac{1}{2}n(n+1)=\frac{1}{2}n^2+O(n)$ flops．//

★4 正則上三角行列 $\overset{n\times n}{A}$ について，線形変換 $\boldsymbol{y}=A^{-1}\boldsymbol{x}$ の計算量は $\frac{1}{2}n(n+1)=\frac{1}{2}n^2+O(n)$ flops．アルゴリズムは

◎**後退代入法**： $y_i=\left(x_i-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}y_j\right)/a_{ii}$ $(i=n,n-1,\cdots,1)$ ：計算量 $\frac{1}{2}n(n+1)=\frac{1}{2}n^2+O(n)$ flops．//

練習問題

数学的に等価でも，計算量が大きく異なることがある．

(1) $\overset{n\times 1}{\boldsymbol{y}}=\overset{n\times n}{A}\ \overset{n\times n}{B}\ \overset{n\times 1}{\boldsymbol{x}}$ の計算法① $\boldsymbol{y}=(AB)\boldsymbol{x}$ と② $\boldsymbol{y}=A(B\boldsymbol{x})$ の計算量を比較せよ．

(2) $q=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}\overset{n\times n}{A}\boldsymbol{x}$ の効率的な計算法を示し，計算量を述べよ．