数値解析
第三回　連立方程式の解法
ガウスの消去法・行列

舟木　剛

平成25年10月16日２限

シラバス

- 授業の目的
  - 工学分野でよく用いられる数値計算の算法ならびにそれらの数値的な特性について理解させる.
- 授業計画
  - 数値計算と誤差（1回）
    - 数値計算の必要性ならびに誤差の種類について説明するとともに，行列式とその性質，行及び列の交換などの基本演算，逆行列の定義と求め方について説明する.
  - 代数方程式（2回）
    - ２分法，Newton-Raphson 法，Bailey 法について解説する．また，多変数に対するNewton-Raphson 法と収束に関する留意点について述べる.
  - 連立方程式（3回）
    - Gauss の消去法，Gauss-Jordan の掃き出し法，LU 分解法の手順ならびに計算複雑度について解説する．また，Jacobi 法，Gauss-Seidel 法，SOR 法などの反復法について手順並びに収束条件について解説する.
  - 行列の固有値（3回）
    - 固有値の性質，べき乗法，Householder 法，QR 法について述べる．QR 法の収束定理について解説する.
  - 補間法（2回）
    - 線形補間，Lagrange 補間，Newton 補間，スプライン補間について述べる．多項式補間については算出方法をスプライン補間については3次のスプライン関数の導出方法を説明する．また，自然なスプライン関数とその特徴について解説する.
  - 関数近似（1回）
    - 最小2乗法による関数の近似について解説する.
  - 数値積分（1回）
    - 台形公式，シンプソンの公式による数値積分について解説する.
  - 常微分方程式（1回）
    - 単区分法である Euler 法，修正Euler 法，Runge-Kutta 法ならびに複区分法である Adams-Moulton の予測子・修正子法について解説する．また，数値不安定性についても解説する.
- 教科書 佐藤・中村共著「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社

連立方程式の求解

- 元数の多い連立方程式の手計算はむずい
  - 連立方程式を計算機で解く
    - 解き方の種類
      - 直接解法
      - 反復解法
    - 代表的な解き方
      - ガウスの消去法→直接解法。乗除算回数低減。精度高める。
      - ガウス・ジョルダン法
      - ヤコビの反復法
      - ガウスザイデル法
      - 三角分解法
      - 共役勾配法

行列式を利用したクラメールの公式（次ページ）
乗算回数$(n^2-1)n!+n$
より計算回数を減らしたい

クラメルの公式

- n元連立方程式
  - $$\begin{aligned} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n&=b_1\\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n&=b_2\\ &\vdots\\ a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n&=b_n \end{aligned}$$
- 一般形$AX=b$
  - $A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n}\\ \vdots & & \ddots & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, x=\begin{bmatrix} x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_n \end{bmatrix}, b=\begin{bmatrix} b_1\\ b_2\\ \vdots\\ b_n \end{bmatrix}$
- クラメルの公式 $x_i=\frac{\det(A_i)}{\det(A)}$
  - $A_i=\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1,i-1} & b_1 & a_{1,i+1} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & & a_{2,i-1} & b_2 & a_{2,i+1} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,i-1} & b_n & a_{n,i+1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$

ガウスの消去法

- n元連立方程式の一般形$AX = b$
  - $$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$
    - 係数項$a_{11} \cdots a_{nn}$, 定数項$b_1 \cdots b_n$，未知数$x_1 \cdots x_n$
- 前進消去による上三角行列への変換
  - $$\begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & & a'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{bmatrix}$$
    - 対角要素より左下の全ての要素を0になるように変換
- 後退代入による求解

ガウスの消去法 前進消去

- 拡大行列を作る(n行n+1列)
  - $$\begin{array}{cc} \text{A} & \text{B} \\ \end{array}$$
    $$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right]$$
  - 次の過程を繰り返す$m = 1 \sim n-1$
    - $i = m+1, m+2, \cdots, n$
      - $j = m+1, m+2, \cdots, n+1$ (bの分を含む)
        - » $a_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{im}}{a_{mm}} a_{mj}$

ガウスの消去法
前進消去

- 第1ステップ$m = 1, i = 2$

$a_{21} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{11}$　$a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12}$　$a_{2n} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{1n}$　$b_1 - \frac{a_{21}}{a_{11}} b_1$

これは計算しない
$i = 2, j = 1$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & & a'_{2n} & b'_2 \\ a_{31} & a_{32} & \ddots & a_{3n} & b_3 \\ \vdots & & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{bmatrix}$$

ガウスの消去法
前進消去

- 第1ステップ$m = 1, i = n$

$a_{n1} - \frac{a_{n1}}{a_{11}} a_{11}$　$a_{n2} - \frac{a_{n1}}{a_{11}} a_{12}$　$a_{nn} - \frac{a_{n1}}{a_{11}} a_{1n}$　$b_n - \frac{a_{n1}}{a_{11}} b_1$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & & a'_{2n} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & \ddots & a'_{3n} & b'_3 \\ \vdots & & & \vdots & \vdots \\ 0 & a'_{n2} & \cdots & a'_{nn} & b'_n \end{bmatrix}$$

これは計算しない
$i = 2, j = 1$

ガウスの消去法
前進消去

- 第2ステップ$m = 2, i = 3$

$$a'_{32} - \frac{a'_{32}}{a'_{22}} a'_{22} \qquad a'_{33} - \frac{a'_{32}}{a'_{22}} a'_{23} \qquad a'_{3n} - \frac{a'_{32}}{a'_{22}} a'_{2n} \qquad b'_{3} - \frac{a'_{32}}{a'_{22}} b'_{2}$$

これは計算しない
$i = 3, j = 2$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ 0 & 0 & a'_{33} & & a'_{3n} & b'_3 \\ 0 & a'_{42} & a'_{43} & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \\ 0 & a'_{n2} & a'_{n3} & \cdots & a'_{nn} & b'_n \end{bmatrix}$$

ガウスの消去法
前進消去

- 第2ステップ$m = 2, i = n$

$$a'_{n2} - \frac{a'_{n2}}{a'_{22}} a'_{22} \qquad a'_{n3} - \frac{a'_{n2}}{a'_{22}} a'_{23} \qquad a'_{nn} - \frac{a'_{n2}}{a'_{22}} a'_{2n} \qquad b'_{n} - \frac{a'_{n2}}{a'_{22}} b'_{2}$$

これは計算しない
$i = n, j = 2$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ 0 & 0 & a'_{33} & & a'_{3n} & b'_3 \\ 0 & 0 & a'_{43} & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & a'_{n3} & \cdots & a'_{nn} & b'_n \end{bmatrix}$$

ガウスの消去法
前進消去

- 第n-1ステップ$m = n-1, i = n$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ 0 & 0 & a'_{33} & & a'_{3n} & b'_3 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a'_{nn} & b'_n \end{bmatrix}$$

対角要素より左下が0となる

$$-\begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & & a'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{bmatrix}$$

$a'_{1i} = a_{1i}$

$b'_i = b_i$

ガウスの消去法
後退代入

- 上三角行列から解を求める

$$-\begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & & a'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{bmatrix}$$

– 最終行nからはじめる
  - $a'_{nn}x_n = b'_n \ \rightarrow \ x_n = \frac{b'_n}{a'_{nn}}$

– $n-1$行
  - $a'_{n-1,n-1}x_{n-1} + a'_{n-1,n}x_n = b'_{n-1}$
    – x_nを代入してx_{n-1}を求める。
      » 後ろから代入していくので，後退代入

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b'_n}{a'_{nn}} \\ x_i = \dfrac{b'_i - \sum_{j=1}^{n-i} a'_{i,i+j}x_{i+j}}{a'_{ii}} \\ (i = n-1, \cdots, 2,1) \end{cases}$$

ガウスの消去法

- 計算手順
  - 前進消去
  - 後退代入
- 特長
  - 密行列に対して用いられることが多い
  - 疎行列の場合は反復解法等を用いる

ピボッティング

- 前進消去

  ピボット（主対角要素）

  - $a_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{im}}{\boxed{a_{mm}}} a_{mj}$
  - 対角要素が0となる時，前進消去不可能
    - 極少の時も桁落ち等の誤差発生
  - $a_{im}(i = m + 1, \cdots, n)$の絶対値が最大の行と入れ替える（枢軸選択）
    - 未知数の順序は変化しない → 部分ピボッティング
      - 行と列の両方を入れ替える完全ピボッティングは未知数の順序も変わる

スケーリング

- 係数間に大きな差（桁違い）がある場合，消去法の前に適用し桁落ちを防ぐ
  - i行目を最大の要素s_iで割る
    - $\sum_{j=1}^{n} \frac{a'_{i,j}}{s_i} x_i = \frac{b'_i}{s_i} \quad (i = 1, \cdots, n)$
      - $s_i = max|a'_{i,j}| \quad (j = 1, \cdots, n)$

ガウスの消去法の計算回数

- 前進消去
  - $m = 1 \sim n - 1 \Rightarrow n - 1$
    - $i = m + 1, m + 2, \cdots, n \Rightarrow n - m$
      - $j = m + 1, m + 2, \cdots, n + 1 \Rightarrow n - m + 1$
        - » $a_{ij} = a_{ij} - \boxed{\frac{a_{im}}{a_{mm}} a_{mj}}$
  - 掛け算の回数 $\frac{a_{im}}{a_{mm}} a_{mj}$
    - $\sum_{m=1}^{n-1} (n - m + 1)(n - m)$
      $= \sum_{m=1}^{n-1} (m^2 - 2nm + n^2 + n - m)$

$$= \sum_{m=1}^{n-1} (m^2 - [2n + 1]m + n[n + 1])$$

$$\sum_{k=1}^{n} k = \frac{n(n+1)}{2}$$

$$\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$

ガウスの消去法の計算回数

- $\sum_{m=1}^{n-1}(m^2-[2n+1]m+n[n+1])$
  $=\frac{(n-1)n(2n-1)}{6}-(2n+1)\frac{(n-1)n}{2}+(n-1)n(n+1)$
  $$=(n-1)n\left\{\frac{(2n-1)}{6}-\frac{(2n+1)}{2}+(n+1)\right\}$$
  $$=\frac{(n-1)n}{6}\{(2n-1)-3(2n+1)+6(n+1)\}$$
  $$=\frac{(n-1)n}{6}\{2n+2\}=\frac{(n-1)n(n+1)}{3}$$

ガウスの消去法の計算回数

- 前進消去
  - 割り算の回数 $\frac{a_{im}}{a_{mm}}$ （$\frac{a_{mm}}{a_{mm}}$を除く）
  - $\sum_{m=1}^{n-1}(n-m)$
    $=(n-1)n-\frac{(n-1)n}{2}=\frac{n(n-1)}{2}$
- 後退代入
  - 掛け算$\sum_{j=1}^{n-i}a'_{i,i+j}x_{i+j}\ (i=n-1,\cdots,2,1)$
    - $j=1,\cdots,n-1$
      - $\sum_{i=n-1}^{1}(n-i)=n(n-1)-\frac{(n-1)n}{2}=\frac{(n-1)n}{2}$
  - 割り算$\frac{b'_i-\sum_{j=1}^{n-i}a'_{i,i+j}x_{i+j}}{a'_{ii}}$
    - 各iで1回 ⇒ n

ガウスの消去法の計算回数

- 合計
  - 掛け算
    - $\frac{(n-1)n(n+1)}{3} + \frac{(n-1)n}{2} = \frac{n(n-1)(2n-5)}{6}$
  - 割り算
    - $\frac{n(n-1)}{2} + n = \frac{n(n+1)}{2}$
  - 合計
    - $\frac{n(n-1)(2n-5)}{6} + \frac{n(n+1)}{2}$
      - n→∞で$\frac{n^3}{3}$に漸近
        - » クラメールの公式の回数$(n^2-1)n!+n$に比べて少ない

連立方程式と逆行列の求解

- $n \times n$正方行列A
  - 行列式
    - 特異行列 $|A| = 0$
    - 正則行列 $|A| \neq 0$
      - $AX = I$を満足する行列X → 逆行列A^{-1}
- ガウスの消去法を変形した逆行列の算出
  - ガウスジョルダン法（掃き出し法）

ガウスジョルダン法による逆行列の算出

- 拡大行列を考える

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} \overbrace{a_{11}}^{} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} & 0 & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{array}\right] \Rightarrow \text{変形}$$

A

  - $a'_{ij} = \frac{a'_{ij}}{a_{ij}} \quad (i = j)$
  - $a'_{ij} = a'_{ij} - \frac{a_{im}}{a_{ij}} a_{mj} \quad (i \neq j)\ (m = 1, \cdots, n)$
  - $$\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & \cdots & 0 & a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & 1 & & 0 & a'_{21} & a'_{22} & & a'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & a'_{n1} & a'_{n2} & \cdots & a'_{nn} \end{array}\right]$$

$A' = A^{-1}$

ピボット行以外のすべての行に消去法を適用する