数値解析
第五回　連立方程式の解法
LU分解
と固有値のさわり

舟木　剛

平成29年11月1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

- ガウスの消去法$AX = b$
  - 係数行列Aが変化しない場合でも，定数ベクトルbの値により，計算途中の係数行列は変化する
    - 計算量大
    - ヤコビの反復法も同様
- LU分解
  - 係数行列が変化しない場合に，計算量を少なくする
    - 先に三角化をすまして，代入計算のみにする
    - 例　回路方程式$Y = ZI, Y = Z^{-1}, I = YV$

LU分解

- n元連立1次方程式の一般形$AX = b$
  - 係数行列Aを行列L, Uの積で表す$A = LU$
    - 係数行列$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$
    - 下三角行列$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$
      - 対角項の右上が0となる　　$l_{ij} = 0(i < j)$
      - 対角項あり(前回のは無かった)

LU分解

- 上三角行列$U = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$
  - 対角項は1　　　$u_{ii} = 1$
  - 対角項の左下が0となる　$u_{ij} = 0 (i > j)$
- 連立1次方程式$AX = LUX = b$
  - $Y = UX$を考える　$\rightarrow$　$LY = b$

LU分解による連立1次方程式の解法

- 連立1次方程式$AX = LUX = b$
  - $Y = UX$を考える　→　$LY = b$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

    - $LY = b$ →前進代入によりYを求める
    - $UX = Y$→後退代入によりXを求める
    - 加減乗除回数はガウスの消去法と同じ
      - 係数行列が変化せず，異なる定数ベクトルに対する求解には手数は減る
      - ガウスの消去法は前進消去

LU分解による連立1次方程式の解法

- $LY = b$の前進代入によるYの求解
  - $l_{11}y_1 = b_1 \quad \rightarrow \quad y_1 = \frac{b_1}{l_{11}}$
  - $l_{21}y_1 + l_{22}y_2 = b_2 \rightarrow \quad y_2 = \frac{b_2 - l_{21}y_1}{l_{22}}$
  - $\sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j + l_{ii}y_i = b_i \quad \rightarrow \quad y_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j}{l_{ii}}$
  - $\sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}y_j + l_{nn}y_n = b_n \rightarrow \quad y_n = \frac{b_n - \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}y_j}{l_{nn}}$

LU分解による連立1次方程式の解法

- $UX = Y$の後退代入によるXの求解
  - $$\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$
  - 後退代入によりXを求める
    - $x_n = y_n$ → $x_n = y_n$
    - $x_{n-1} + u_{n-1,n} x_n = y_{n-1}$ → $x_{n-1} = y_{n-1} - u_{\mathrm{n-1,n}} x_n$
    - $x_i + \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j = y_i$ → $x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j$
    - $x_1 + \sum_{j=2}^{n} u_{ij} x_j = y_1$ → $x_1 = y_1 - \sum_{j=2}^{n} u_{ij} x_j$

LU分解

- LU分解のやり方
  - $$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$
  - 係数行列の要素
    - $a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$
      - $l_{ik} = 0 (i < k)$より$l_{ik} u_{kj} = 0\ (k > i)$
      - $a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} u_{kj}$となる

LU分解

- 係数行列の要素
  - $u_{ii} = 1, u_{ij} = 0 (i > j)$の性質を利用
    - $i < j$の要素 $a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} u_{kj}$　　　下三角
    - $i = j$の要素 $a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} u_{ki} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{ki} + l_{ii}$
    - $i > j$の要素 $a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} u_{kj} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ij}$
      - $i \geq j$の要素　　$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ij}$

まとめる

LU分解

- 上･下三角行列要素を求める
  - 1列目
    - $a_{11} = \sum_{k=1}^{1-1} l_{1k}u_{k1} + l_{11} = l_{11} \quad \rightarrow \quad l_{11} = a_{11}$
    - $a_{21} = \sum_{k=1}^{1-1} l_{2k}u_{k1} + l_{21} = l_{21} \quad \rightarrow \quad l_{21} = a_{21}$
    - $a_{i1} = \sum_{k=1}^{1-1} l_{ik}u_{k1} + l_{i1} = l_{i1} \quad \rightarrow \quad l_{i1} = a_{i1} \quad (i = 1, \cdots, n)$
  - 2列目
    - $a_{12} = \sum_{k=1}^{1} l_{1k}u_{k2} = l_{11}u_{12} \quad \rightarrow \quad u_{12} = \frac{a_{12}}{l_{11}}$
    - $a_{22} = \sum_{k=1}^{2-1} l_{2k}u_{k2} + l_{22} = l_{21}u_{12} + l_{22}$
      $\rightarrow \quad l_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$
    - $a_{32} = \sum_{k=1}^{2-1} l_{3k}u_{k2} + l_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}$
      $\rightarrow l_{32} = a_{32} - l_{31}u_{12}$
    - $a_{i2} = \sum_{k=1}^{2-1} l_{ik}u_{k2} + l_{i2} = l_{i1}u_{12} + l_{i2}$
      $\rightarrow l_{i2} = a_{i2} - l_{i1}u_{12} \quad (i = 1, \cdots, n)$

LU分解

- 3列目
  - $a_{13} = \sum_{k=1}^{1} l_{1k}u_{k3} = l_{11}u_{13} \quad \rightarrow \quad u_{13} = \frac{a_{13}}{l_{11}}$
  - $a_{23} = \sum_{k=1}^{2} l_{2k}u_{k3} = l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23}$
    $\rightarrow \quad u_{23} = \frac{a_{23} - l_{21}u_{13}}{l_{22}}$
  - $a_{33} = \sum_{k=1}^{3-1} l_{3k}u_{k2} + l_{33} = \sum_{k=1}^{2} l_{3k}u_{k2} + l_{33}$
    $\rightarrow \quad l_{33} = a_{33} - \sum_{k=1}^{2} l_{3k}u_{k3}$
  - $a_{43} = \sum_{k=1}^{3-1} l_{4k}u_{k3} + l_{43} = \sum_{k=1}^{2} l_{4k}u_{k3} + l_{43}$
    $\rightarrow \quad l_{43} = a_{43} - \sum_{k=1}^{2} l_{4k}u_{k3}$
  - $a_{i3} = \sum_{k=1}^{3-1} l_{ik}u_{k3} + l_{i3} = \sum_{k=1}^{2} l_{ik}u_{k3} + l_{i3}$
    $\rightarrow \quad l_{i3} = a_{i3} - \sum_{k=1}^{2} l_{ik}u_{k3} \quad (i = 1, \cdots, n)$

LU分解

- j列目
  - 1行目の要素から計算
  - $i < j$ に対して$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}u_{kj} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} + l_{ii}u_{ij}$

    $$\rightarrow \qquad u_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}}{l_{ii}}$$
  - $i \geq j$に対して$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} + l_{ij}$

    $$\rightarrow \qquad l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}$$
  - $l_{ij} = 0(i < j), u_{ij} = 0(i > j), u_{ii} = 1$は計算不要
    - a_{ij}の参照は1回

LU分解

- メモリの節約(大規模計算する現代でも有効)
  - 係数行列$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$
  - 計算結果を逐次格納する
  - 分解結果$\begin{bmatrix} l_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & l_{22} & & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}, u_{ii} = 1$は既知

LU分解を用いた行列式の計算

- 行列式の性質
  - $\det(AB) = \det(A)\det(B)$
- 係数行列Aの行列式の値
  - $A = LU$
  - $\det A = \det(LU) = \det L \cdot \det U$
  - $\det L = l_{11} l_{22} \cdots l_{nn}$
  - $\det U = 1$
  - $\det A = \det L = l_{11} l_{22} \cdots l_{nn}$

行列の固有値

- 用途
  - 数値解析での収束性評価（連立方程式の反復解法等）
  - 制御工学などでシステムの振る舞いの安定性を判断
  - 行列のままで処理　→　代数方程式への変形における誤差の抑制
- 解法
  - 解析解　　　　　　→　難しい（無い事もある）
  - べき乗法（累乗法）　　→　最大（支配的）固有値を求める
  - ヤコビ法，ハウスホルダー法　→　対称行列用
  - QR法　　→　非対称行列も可
- 固有値・固有ベクトルからべき乗法による数値解の求解

固有値と固有ベクトル
固有値問題

- 正方行列A（ $n \times n$ ）の固有値λ（スカラー）と固有ベクトルX（ n次元）の関係
  - $AX = \lambda X$
    - λ:行列Aの固有値
    - X:行列Aの固有値λに属する固有ベクトル
  - $(A - \lambda I)X = 0$
    - $X \neq 0$となる解をもつ必要十分条件
      - $\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0$
  - 展開すると特性方程式になる
    - $\lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + \cdots + c_{n-1}\lambda + c_n = 0$
    - これを解いたものが固有値λ

固有ベクトル

- 行列Aの固有値λ_iに対する固有ベクトルX_iを求める
  - $\det(A - \lambda_i I) = 0$
    - $(A - \lambda_i I)X_i = 0$を満たす固有ベクトルX_iは一意に定まらない
  - 固有値が単根（実数）の場合
    - 値が0とならない要素x_iを一つ定める
    - あと$(x_j, j \neq i)$は連立方程式で求める
  - 固有値がn重根の場合
    - 対応するn 個の固有ベクトルは一次独立なベクトル