数値計算　第7回　線形方程式

- テーマ：　線形方程式とガウス消去法

- 線形方程式：　数値計算で頻繁に使用
- 効率よく解く方法を理解する
  - 直接法　有限回の計算量で計算（説明）
  - （反復法　解に収束するベクトル列を逐次計算）
- ガウス消去法（直接法）
  - 行列の計算でやや面倒
  - 基本的に線形方程式の手計算方法と同じ（中学校で学習）

今回の演習

- 演習7-1 ガウス消去法による解法
- 演習7-2 MATLAB関数による解法

- 演習7-3 ガウス消去法による線形方程式の解法(ピボット選択つき)

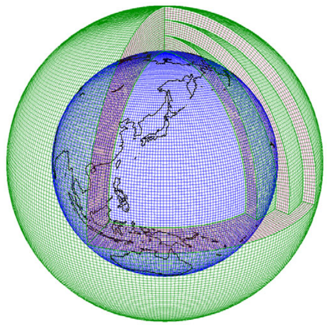
線形方程式は何に使われるか

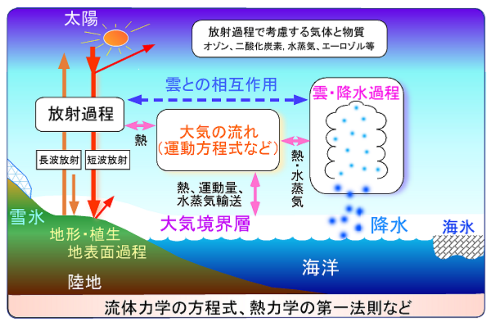
- CADで設計した車体の強度計算
- 数値予報，経済予測など
- 行列計算の殆ど全てで使われる
  - 計算時間の大半を線形方程式の計算に費やす

- 計算の効率化が研究されている
- 問題に向いた計算ライブラリがある
- このライブラリを利用することが堅実

数値予報

- 物理学に基づく数値予報モデルを作成
- 風や気温などの時間変化を数値計算
- 将来の大気の状態を予測する

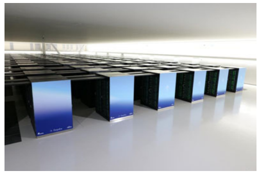




出典：　http://www.jma.go.jp/jma/kishou/know/whitep/1-3-1.html

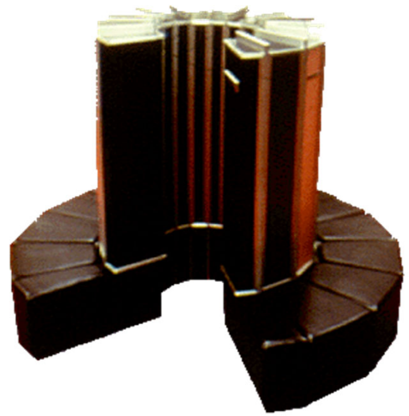
スーパーコンピュータの性能

- スーパーコンピュータ「富岳」、4つのスパコンランキングで世界第１位を獲得！
- ①「TOP500」②「HPCG（High Performance Conjugate Gradient）」（大規模な連立1次方程式の求解方法）
- ③「HPL-AI」④「Graph500」



出典：理化学研究所
https://www.rccs.riken.jp/library/topics/fugaku-no1.html

歴史的なスーパーコンピュータ



- 名古屋電気学園
- 淳和記念館所蔵
  - Cray-1
  - 1970年代
- 性能
  - 80MHz　Cray-1
  - 160　MFlops

時間があれば
スパコンの紹介

二元連立線形方程式の解法

線形方程式

$$\begin{array}{llll} 2x_1 & +3x_2 & =5 & (1) \\ x_1 & +x_2 & =2 & (2) \end{array}$$

(2)の x_1 を消去

$$\begin{array}{llll} 2x_1 & +3x_2 & =5 & (1) \\ 0 & -\frac{1}{2}x_2 & =-\frac{1}{2} & (2)' \end{array}$$

$$x_1+\frac{3}{2}x_2=\frac{5}{2}$$

(1)式を2で割って
(2)式から引く

x_2 の値を求める

$$x_2=(-\frac{2}{1})(-\frac{1}{2})=1 \quad (2)''$$

x_1 の値を求める

$$x_1=\frac{1}{2}(5-3x_2)=1 \quad (1)'$$

三元連立線形方程式の場合(１)

線形方程式　前進消去

$$\begin{array}{lllll} 2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\ x_1 & +2x_2 & +3x_3 & =6 & (2) \\ x_1 & +x_2 & +3x_3 & =5 & (3) \end{array}$$

(1)を使って
(2)(3)の x_1 を消去

$$\begin{array}{lllll} 2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\ 0 & +\frac{1}{2}x_2 & +x_3 & =\frac{3}{2} & (2)' \\ 0 & -\frac{1}{2}x_2 & +x_3 & =\frac{1}{2} & (3)' \end{array}$$

(2)を使って
(3)の x_2 を消去

$$\begin{array}{lllll} 2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\ 0 & +\frac{1}{2}x_2 & +x_3 & =\frac{3}{2} & (2)' \\ 0 & 0 & +2x_3 & =2 & (3)'' \end{array}$$

$x_3=1$　を計算

同様に $x_2=1,\ x_1=1$　を計算

教科書49ページ

三元連立線形方程式の場合(2)

後退代入

$$
\begin{array}{lllll}
2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\
 & \frac{1}{2}x_2 & +x_3 & =\frac{3}{2} & (2)' \\
 & & 2x_3 & =2 & (3)''
\end{array}
$$

(3)”でx_3を計算
(2)’ でx_3を使って，x_2を計算
(1)で x_3, x_2を使って，x_1を計算

$$x_3=\frac{2}{2}=1$$
$$x_2=2\cdot(\tfrac{3}{2}-1\cdot x_3)=2\cdot\tfrac{1}{2}=1$$
$$x_1=\tfrac{1}{2}\cdot(9-3x_2-4x_3)=\tfrac{1}{2}\cdot 2=1$$

行列で表現すると(１)

前進消去

$$
\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 9 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix}
\Leftarrow
\begin{array}{lllll}
2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\
x_1 & +2x_2 & +3x_3 & =6 & (2) \\
x_1 & +x_2 & +3x_3 & =5 & (3)
\end{array}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1/2 & 1 \\ 0 & -1/2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 9 \\ 3/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}
\Leftarrow
\begin{array}{lllll}
2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\
0 & +1/2\,x_2 & +x_3 & =3/2 & (2)' \\
0 & -1/2\,x_2 & +x_3 & =1/2 & (3)'
\end{array}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1/2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 9 \\ 3/2 \\ 2 \end{pmatrix}
\Leftarrow
\begin{array}{lllll}
2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\
0 & +1/2\,x_2 & +x_3 & =3/2 & (2)' \\
0 & 0 & +2x_3 & =2 & (3)''
\end{array}
$$

教科書46ページ

5.1　線形方程式のメモリへの格納

n変数$x_1\ x_2\ x_3$ …に関する連立線形方程式

$$
\begin{array}{l}
a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1 \\
a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2 \qquad (1) \\
\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n=b_n
\end{array}
$$

行列表示

$$
\boldsymbol{A}x=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}=b \qquad (2)
$$

教科書46ページ

行列での表現と名称

$$
\boldsymbol{A}x=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}=b \qquad (2)
$$

$$Ax=b$$

行列A　　　：係数行列
ベクトルb　：右辺ベクトル
ベクトルx　：解ベクトル

教科書49ページ

5.3　前進消去　ガウス消去法(1)

- 第1列消去　第2~n式から変数x_1を消去する
  - 第1式を$r=a_{i1}/a_{11}$倍して第i式から引く

$$\boldsymbol{A}x=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}=b \qquad (2)$$

- 新しい第i式

$$a'_{i2}x_2+a'_{i3}x_3+\cdots+a'_{in}x_n=b'_i,$$
$$a'_{ij}=a_{ij}-ra_{1j}\quad(1\le j\le n)\qquad b'_i=b_i-rb_1$$

教科書50ページ

第1列消去の結果

- 第1列を消去した結果

$$\boldsymbol{A}x=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}=b$$

なお $a'_{ij}, b'_i\ (i\ge 2)$を a_{ij}, b_iと略記

教科書50ページ

第k列消去

- 青枠内に繰り返して第k-1列を消去した結果

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & & a_{1n} \\ 0 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & 0 & a_{kk} & \cdots & a_{kn} \\ 0 & 0 & a_{nk} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\quad b=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}\qquad (8)$$

- 第k列消去の係数式

$$r=a_{ik}/a_{kk},$$
$$a'_{ij}=a_{ij}-ra_{ij}\quad(k\le j\le n)\qquad (9)$$
$$b'_i=b_i-rb_k$$

教科書51ページ

前進消去と後退代入

- 第1列から第n-1列を消去

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix}\qquad b=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}\qquad (10)$$

- 上三角行列の係数行列に変形

教科書49ページ

後退代入　x_nからx_1で解を計算

$$x_i=(b_i-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j)/a_{ii}\quad(i=n,n-1,\cdots,1)\qquad (6)$$

演習7-1 ガウス消去法

- moodleからex7_q.mlxをダウンロード
- ガウス消去法 gauelを使用
- 例題の3x3の線形方程式を解いてみる

$$
\begin{aligned}
2x_1 &\quad +3x_2 \quad +4x_3 \quad =9\\
x_1 &\quad +2x_2 \quad +3x_3 \quad =6\\
x_1 &\quad +x_2 \quad +3x_3 \quad =5
\end{aligned}
\Rightarrow
\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 9 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix}
$$

$$Ax = b$$

演習7-2　MATLAB関数の使用

MATLAB関数を使って8-1と同じ問題を解く
% 方法(1)　 ¥ (Macはバックスラッシュ)を使う

x=A¥b

% 方法(2)　 逆行列関数inv()を使う方法
x=inv(A)*b

inv(A)の使用は
効率が悪いため推奨されない

ガウス消去法の適用条件

- 正則行列であること
（逆行列が存在する行列）
- 正則でない場合を判定する必要がある

ピボット選択と正則性判定

教科書52ページ

5.4　ピボット選択と正則性判定

- 前進消去中a_{kk}=0だと，rが計算できずプログラムが破綻

$$
\begin{aligned}
& r = a_{ik} / a_{kk}, \\
& a'_{ij} = a_{ij} - r a_{ij} \quad (k \le j \le n) \qquad (9) \\
& b'_i = b_i - r b_k
\end{aligned}
$$

- 部分ピボット選択法
  - a_{ik}が0でない行と交換する
  - 絶対値最大の$|a_{ik}|$をさがして，k行とp行を交換する

$$|a_{pk}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}| \qquad (12)$$

- 正則性判定
  - 行列Aが正則であればa_{kk}が0ではない
  - a_{kk}が0であれば，計算不能として停止

教科書53ページ

5.5　ガウス消去法のプログラム
ピボット選択つき

```
for(k = 1; k ≤ n; k++){                /* 前進消去 */
    p = k;                             /* ピボット選択 */
    for(i = k + 1; i ≤ n; i++){
        if( |a[p][k]| < |a[i][k]| ) p = i;
    }
    if( |a[p][k]| ) < ε){              /* 正則性判定 */
        return k;                      /* 異常終了 */
    }
    if(p ≠ k){
        for(j = k; j ≤ n; j++){        /* 行交換 */
            a[k][j] ↔ a[p][j];
        }
        b[k] ↔ b[p];
    }
    for(i = k + 1; i ≤ n; i++){        /* 消去 */
        r = a[i][k]/a[k][k];
        for(j = k + 1; j ≤ n; j++){
            a[i][j] −= r * a[k][j];
        }
        b[i] −= r * b[k];
    }
}
```

```
for(i = n; i ≥ 1; i−−){                /* 後退代入 */
    b[i] = ( b[i] − Σ_{j=i+1}^{n} a[i][j] * b[i] ) /a[i][i];
}
return 0;
```

b[j]の誤植

演習7-3 ガウス消去法　ピボット操作付き

- ガウス消去法 gauel
- ピボット操作付きガウス消去法 gauel_pv
- 二つの方法を用いて以下の線形方程式を解いて比較しなさい

$(\delta = 1.0^{-20})$

$$\begin{pmatrix} \delta & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$Ax = b$$

$$x_1 = \frac{5}{1+2\delta} \cong 5.00$$

$$x_2 = \frac{1-3\delta}{1+2\delta} \cong 1.00$$

今回の講義のまとめ

- テーマ：　線形方程式とガウス消去法

- 線形方程式：　数値計算で頻繁に使用
- ガウス消去法
  - 行列の計算は面倒そうに見えるが
  - 基本的に線形方程式の手計算方法と同じ（中学校で学習した方法）
- 次回　線形方程式(2)
  - LU分解法

次回　線形方程式(2)

- テーマ：　LU分解法

- LU分解法
  - 同じ係数行列Aを持つ問題を解きたい場合
  - A^{-1}（逆行列）を一旦作っておけば簡単

$$Ax = b,\ Ay = c,\ Az = d$$

$$x = A^{-1}b,\ y = A^{-1}c,\ z = A^{-1}d,$$

- LU分解法はA^{-1}計算より効率的で高精度
  - これを計算して実証する