Last modified: March 27, 2025

講義名
福祉音響学

担当
村上 泰樹

連絡先
murakami@design.kyushu-u.ac.jp

Unit
7

1　この単元の目的

この単元では、連立方程式の解を求めるめの数値計算法を学ぶ。連立方程式は、未知の変数 x に関する複数の方程式であり、それらの方程式を同時に解くことで、未知の変数の値を求めることができる。例えば、2 つの未知数 x_1 と x_2 に対する連立方程式の例：

$$3x_1 + 2x_2 = 7 \tag{1}$$
$$x_1 - 4x_2 = -3 \tag{2}$$

Unit 8 以降で、連立方程式を用いて、数値計算を行う際に必要となる。

2　連立方程式の行列表現

数値計算的には、連立方程式を行列の形式で

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{3}$$

と表現し、行列の演算を用いて解くことができる。ここで、

- $\mathbf{A}$ は係数行列
- $\mathbf{x}$ は未知変数のベクトル
- $\mathbf{b}$ は定数項のベクトル

である。数値計算では、行列 $\mathbf{A}$ の逆行列 $\mathbf{A}^{-1}$ を求めることで、未知変数のベクトル $\mathbf{x}$ を求めることができる。

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \tag{4}$$

ただし、連立方程式を解くために逆行列 $\mathbf{A}^{-1}$ を計算することは一般的に避けるべきである。

$n \times n$ 行列の逆行列計算には一般的に $O(n^3)$ の計算量が必要である。この計算において、逆行列 A^{-1} を明示的に求めることは計算効率の観点から最適ではない。特に大規模な行列では計算コストが非常に高くなる。

逆行列の計算過程では多くの浮動小数点演算が発生し、これらの計算では丸め誤差が生じる：

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} adj(A) \tag{5}$$

ここで行列式 $\det(A)$ の計算と随伴行列 $adj(\mathbf{A})$ の計算の両方で誤差が発生し、それが伝播・増幅される。特に条件数 $\kappa(\mathbf{A})$ の大きい行列では数値計算上の不安定性が増大する。

逆行列そのものが必要場合もある。

- 制御理論における伝達関数 $H(s) = C(sI - A)^{-1}B + D$ の計算
- 線形変換の特性を理論的に研究する場合

このような場合には、計算コストや数値的な問題があったとしても、逆行列の計算が正当化される。

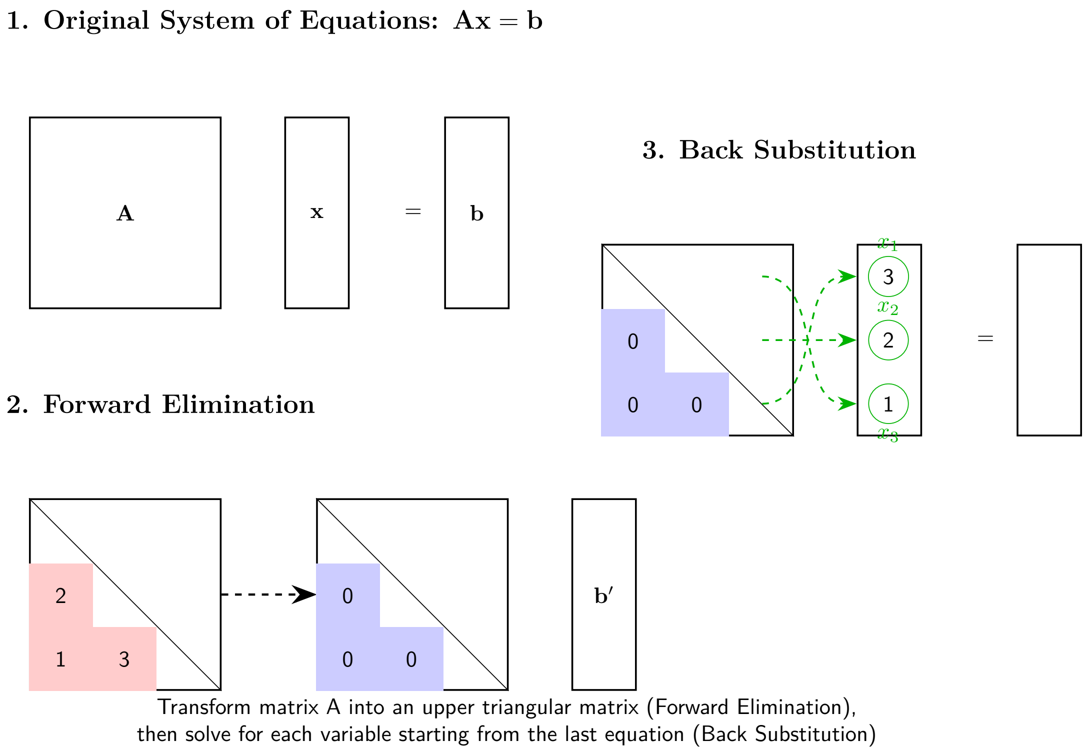


Fig. 1　Gaussian elimination

3　Gaussian Elimination（ガウスの消去法）

連立方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を解くための主要な数値解法について詳細に説明する。

ガウスの消去法は連立一次方程式を解くための最も基本的な方法である (図 1)。この方法では、行基本変形を用いて係数行列を上三角行列に変換する。

1. **前進消去（Forward Elimination）**：行基本変形を使い、行列の左下部分（対角線より下の部分）をゼロにする。
2. **後退代入（Back Substitution）**：得られた上三角行列を用いて、最後の方程式から順に未知数を求めていく。

例えば、$3x + 2y = 7, x - 4y = -3$ という方程式を解く場合：

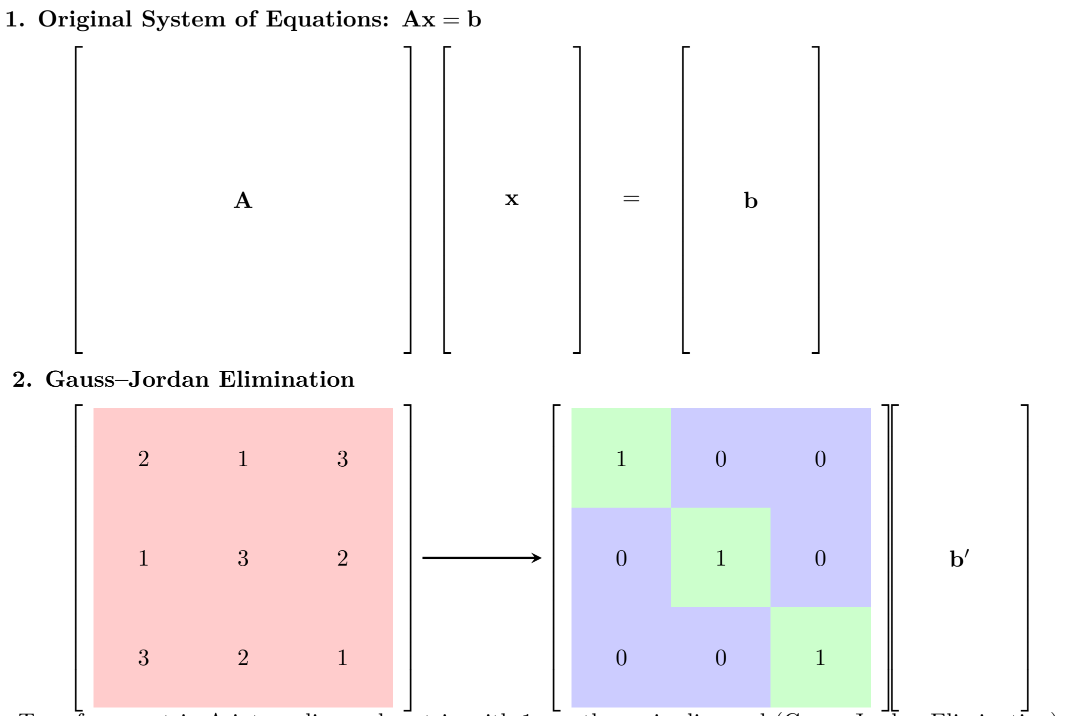
- 最初の方程式から 2 番目の方程式の 3 倍を引くと、$-14y = -16$ が得られる
- これより $y = 8/7$ が求まる
- 最初の方程式に代入すると $3x + 2(8/7) = 7$ となり、$x = 1$ が得られる

計算量はおよそ $O(n^3)$ である（n は未知数の数)。

4　Gauss-Jordan Elimination（ガウス・ジョルダン掃き出し法）

ガウス・ジョルダン掃き出し法はガウスの消去法を拡張した手法で、係数行列を完全な対角形（理想的には単位行列）に変換する (図 2)。

1. **前進消去 (Forward Elimination)**：ガウスの消去法と同様に、対角線より下の要素をゼロにする。
2. **後退消去（Backward Elimination）**：さらに対角線より上の要素もゼロにする。



Transform matrix A into a diagonal matrix with 1s on the main diagonal (Gauss-Jordan Elimination), then the solution x directly corresponds to the transformed right-hand side b'

Fig. 2　Gauss–Jordan elimination

この方法では、変換後の増大行列（拡大係数行列）の右側の列が直接解を与えるため、後退代入のステップが不要である。また、この方法は行列の逆行列を計算する際にも利用できる。

ガウス・ジョルダン法は計算量がガウスの消去法よりもやや多くなるが（約 1.5 倍）、解の形が明示的に得られる利点がある。教育目的や小規模な問題、または行列の逆行列も必要な場合に適している。

5　LU Decomposition（LU 分解）

5.1　基本概念

LU 分解は行列 $\mathbf{A}$ を下三角行列 $\mathbf{L}$ と上三角行列 $\mathbf{U}$ の積に分解する方法である：

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU} \tag{6}$$

ここで：

- $\mathbf{L}$ は対角成分が 1 である下三角行列（単位下三角行列）
- $\mathbf{U}$ は上三角行列

5.2　LU 分解のアルゴリズム

基本的な LU 分解は、ガウスの消去法に基づいている (図 3)。

1. 行列 $\mathbf{A}$ の最初の列に対してガウス消去を行い、1 行目以外の要素を 0 にする
2. 2 列目以降に対して同様の操作を繰り返す
3. この過程で行った演算（乗数）を記録し、それを $\mathbf{L}$ の要素とする
4. 消去後の行列が $\mathbf{U}$ となる

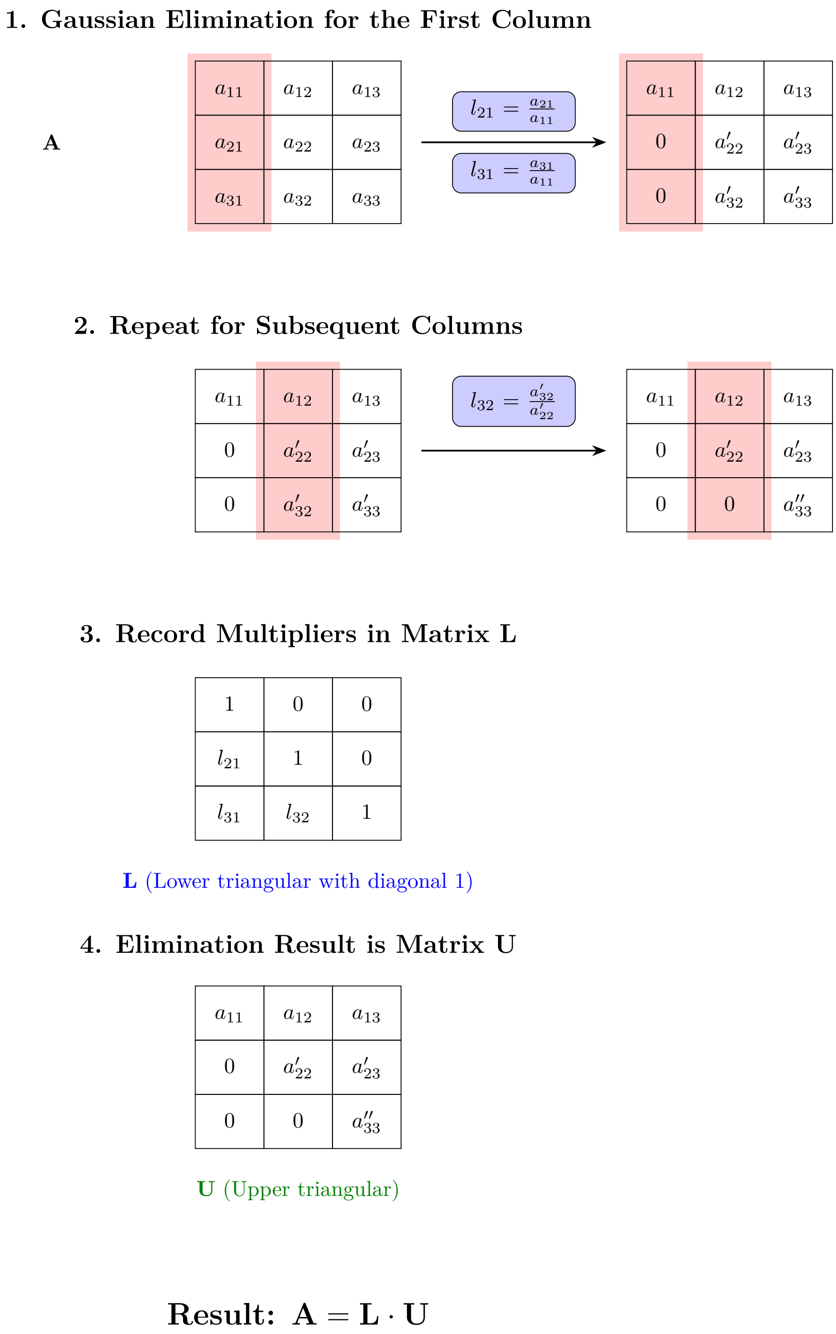


Fig. 3　LU decomposition

5.2.1　具体例

例えば、3×3 行列での分解を考える：

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

LU 分解を行うと：

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0.25 & -2.5 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2 \\ 0 & -0.5 & 2 \\ 0 & 0 & 5.5 \end{pmatrix} \tag{8}$$

となり、$\mathbf{LU} = \mathbf{A}$ が成り立つ。

5.3 クイズ 1

- 前節で得られたい行列 $\mathbf{A}$ から $\mathbf{L}$ と $\mathbf{U}$ を求めよ。
- 元の行列 $\mathbf{A}$ を再構成せよ。

5.4 連立方程式の解法

LU 分解を用いると、線形方程式系 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を効率的に解くことができる：

1. まず $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ を解いて $\mathbf{y}$ を求める（前進代入）
2. 次に $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ を解いて $\mathbf{x}$ を求める（後退代入）

5.4.1 前進代入（Forward Substitution）

$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ を解く過程である：

$$\begin{align} y_1 &= b_1 \tag{9} \\ y_2 &= b_2 - L_{21}y_1 \tag{10} \\ y_3 &= b_3 - L_{31}y_1 - L_{32}y_2 \tag{11} \\ &\vdots \tag{12} \\ y_n &= b_n - \sum_{j=1}^{n-1} L_{nj}y_j \tag{13} \end{align}$$

5.4.2 後退代入（Back Substitution）

$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ を解く過程である：

$$\begin{align} x_n &= \frac{y_n}{U_{nn}} \tag{14} \\ x_{n-1} &= \frac{y_{n-1} - U_{n-1,n}x_n}{U_{n-1,n-1}} \tag{15} \\ &\vdots \tag{16} \\ x_i &= \frac{y_i - \sum_{j=i+1}^{n} U_{ij}x_j}{U_{ii}} \tag{17} \end{align}$$

5.5 LU 分解の利点

1. **複数の右辺に対する効率性**: 一度 LU 分解を行えば、同じ係数行列で異なる右辺ベクトル $\mathbf{b}$ に対して、分解を再計算することなく効率的に解を求められる。
2. **逆行列の計算**: LU 分解を用いて効率的に逆行列を計算できる。

5.6 計算量

LU 分解の計算量はガウスの消去法と同様に $O(n^3)$ である。しかし、複数の方程式 $\mathbf{A}\mathbf{x}_i = \mathbf{b}_i$ $(i = 1, 2, \ldots, k)$ を解く場合：

- LU 分解は $O(n^3)$ の計算量が一度だけ必要
- 各右辺ベクトルに対する前進・後退代入は $O(n^2)$ の計算量

つまり、k 個の方程式を解く場合の総計算量は $O(n^3 + kn^2)$ となり、k が大きい場合にガウスの消去法（計算量 $O(kn^3)$）よりも効率的である。

6 クイズ 2

Numpy もしくは Scipy を用いて、以下の連立方程式を解きなさい。

$$3x_1 + 2x_2 = 7 \tag{18}$$

$$x_1 - 4x_2 = -3 \tag{19}$$

np.linalg.solve と LU 分解から得られた解の値を比較せよ。

7 逆行列の計算

逆行列を計算することは一般的に避けるべきであるが、逆行列が必要な場合には制御工学や線形代数などの分野では用いられる。これらの分野は、音響工学と密な関係があるため、必然的に逆行列の計算が必要となる場面もある。

先に述べた、Gauss-Jordan Elimination はや LU Decomposition を用いて逆行列を計算することができる。これらの関係を図示すると、図 4 のようになる。

一見すると、逆行列を求めるために Gauss-Jordan 消去法と LU 分解を用いることに大きな違いはないように思える。どちらも行列の変形を通じて解を求める方法だからである。しかし、実用面では大きな差がある。

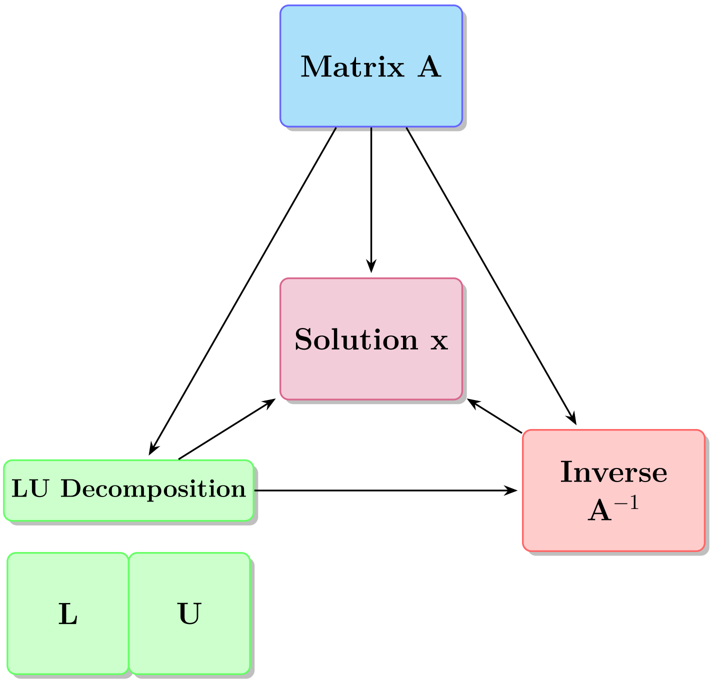
1. 疎構造の保存
   LU 分解では、元の行列の疎構造（ゼロの位置パターン）がある程度保存される。Gauss–Jordan 法では完全な逆行列を作るため、元々ゼロだった部分も計算過程で埋まっていく。
2. 計算の効率性
   疎行列では非ゼロ要素だけを保存・操作することで、メモリ使用量と計算量を大幅に削減できます。LU 分解後は、前進代入と後退代入というステップで解を求められるが、これらのプロセスも疎構造を活かせるため、高速に計算できる。
3. 反復解法との組み合わせ
   大規模疎行列では、LU 分解を前処理として使い、その後に共役勾配法などの反復解法を適用するハイブリッド手法も効果的である。
4. 部分的分解の活用
   完全な LU 分解ではなく、不完全 LU 分解（ILU）を使って近似解を効率的に求めることも可能である。
5. 並列計算の適用
   疎行列向けの LU 分解アルゴリズムは並列計算に適しており、大規模問題での計算速度を向上させられる。

8 Unit 7 のまとめ

音響工学を含む多くの計算応用に不可欠な連立一次方程式を解くための様々な数値計算法について説明した。

8.1 連立方程式の行列表現

- 連立方程式は $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ と表現され、$\mathbf{A}$ は係数行列、$\mathbf{x}$ は未知数ベクトル、$\mathbf{b}$ は定数項ベクトル



- Matrix inversion (A^{-1}) is theoretically clear but computationally expensive and prone to errors
- The LU decomposition method efficiently solves Ax = b and provides numerical stability

Fig. 4 Relationships Between Matrix A, Inverse A^{-1}, and LU Decomposition

- 理論的には $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ で解けるが、逆行列 $\mathbf{A}^{-1}$ を直接計算することは計算効率と数値的安定性の観点から一般的に避けられる

8.2 ガウスの消去法（Gaussian Elimination）

- 前進消去によって係数行列を上三角行列に変換する基本的な方法
- 最後の方程式から順に未知数を求める後退代入
- 計算量：$O(n^3)$

8.3 ガウス・ジョルダン掃き出し法（Gauss-Jordan Elimination）

- ガウスの消去法を拡張し、係数行列を対角形に変換する手法
- 後退代入のステップが不要になるよう単純化
- 教育目的や行列の逆行列計算に有用
- ガウスの消去法よりもやや計算コストが高い

8.4 LU 分解（LU Decomposition）

- 行列 $\mathbf{A}$ を下三角行列 $\mathbf{L}$ と上三角行列 $\mathbf{U}$ の積に分解する（$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$）
- プロセス：
  - 列ごとにガウス消去法を適用
  - 消去過程で使用した乗数を行列 $\mathbf{L}$ の要素として記録
  - 消去後の行列が $\mathbf{U}$ となる

- 連立方程式の解法：
  - $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ を前進代入で解く
  - $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ を後退代入で解く
- 複数の右辺ベクトル $\mathbf{b}$ に対して特に効率的
- 計算量：分解に $O(n^3)$ + 右辺ごとに $O(n^2)$

8.5 逆行列の計算

- 一般的には避けられるが、制御理論や線形代数では時に必要となる
- LU 分解は特に疎行列の逆行列計算に利点がある：
  - 疎構造を保存する
  - 大規模な疎行列系に対してより効率的
  - 反復解法と組み合わせることが可能
  - 並列計算に適している