数値計算法 (8)

担当：櫻井 鉄也，今倉 暁，二村 保徳
TA ：加藤駿介

今日の講義内容

- 今日の授業
  - 連立一次方程式
    - 連立一次方程式の概要
    - 行列とベクトルを用いた表現
  - 数値解法
    - LU分解
    - 前進・後退代入

今日の授業

連立一次方程式

連立一次方程式の概要

- 連立一次方程式の例
  - 例：鶴亀算・怪獣算
    - 鶴と亀がいます．合わせて頭が8つ足が26本ありました.鶴と亀はそれぞれ何匹いますか？

$$\begin{cases} \text{頭の式} & x + y = 8 \\ \text{足の式} & 2x + 4y = 26 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 26 \end{pmatrix}$$

    - ゴジラとモスラとキングギドラがいます．合わせて頭が8つ, 足が24本, 尻尾が4本ありました. ゴジラとモスラとキングギドラはそれぞれ何匹いますか？

$$\begin{cases} \text{頭の式} & x + y + 3z = 8 \\ \text{足の式} & 2x + 6y + 2z = 24 \\ \text{尻尾の式} & x + 2z = 4 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 2 & 6 & 2 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 24 \\ 4 \end{pmatrix}$$

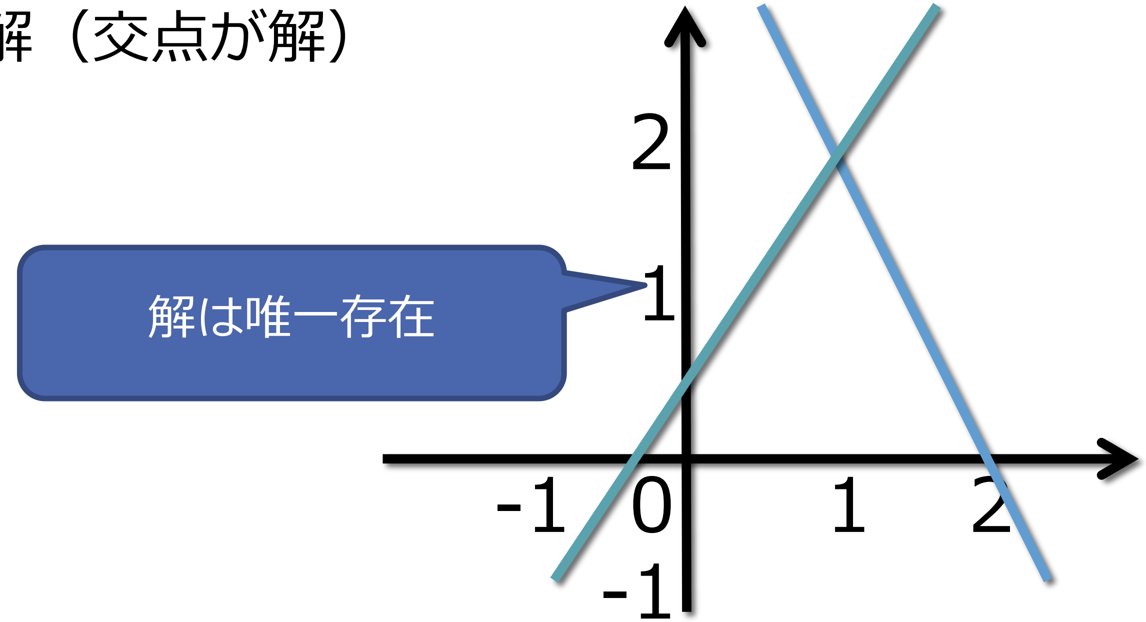
連立一次方程式の概要

- 連立一次方程式の解の分類
  - 例1
    - 方程式

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ -1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} 2x + y = 4 \\ 3x - 2y = -1 \end{cases}$$

このとき2つの直線の交わる点が解。

    - 解（交点が解）



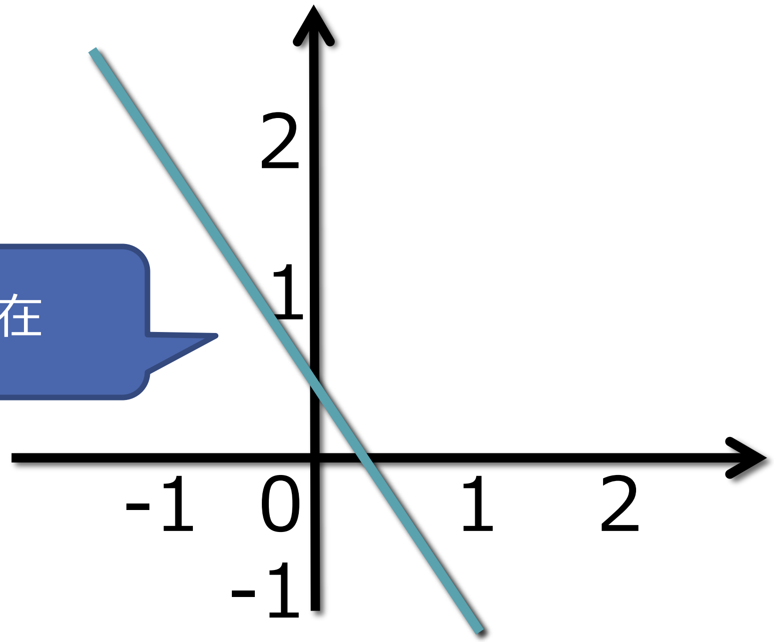
連立一次方程式の概要

- 連立一次方程式の解の分類
  - 例２
    - 方程式

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} 3x + 2y = 1 \\ 6x + 4y = 2 \end{cases}$$

２つの直線が重なる場合。

    - 解（交点が解）



解は無限に存在

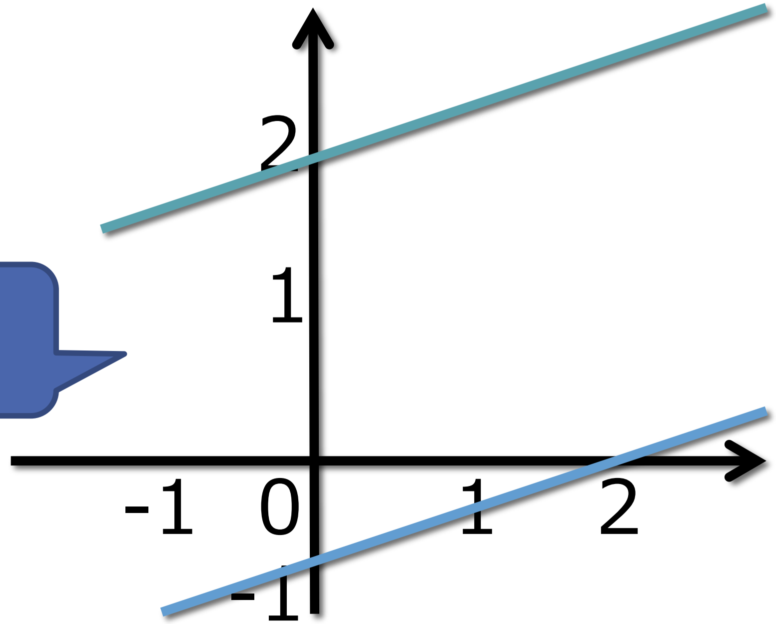
連立一次方程式の概要

連立一次方程式の解の分類

- 例 3
  - 方程式

$$\begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 2 & -6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -12 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} -x + 3y = -2 \\ 2x - 6y = -12 \end{cases}$$

  - 解（交点が解）



解は存在しない

このとき、2つの直線が平行であるため、交わらず解が存在しない。

行列とベクトルを用いた表現

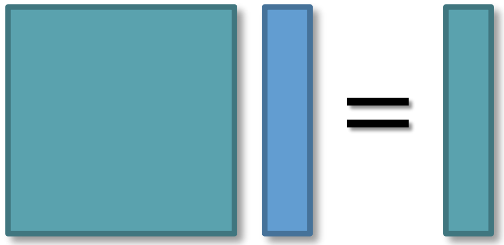
- 連立一次方程式の行列とベクトルを用いた表現
  - 入力： $A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ 出力： $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

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

$$
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}
$$

一般に変数がn個の場合を行列とベクトルを用いて表現する。

$$
\Leftrightarrow \quad A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}
$$



連立一次方程式の分類

- 連立一次方程式の分類と解
  - 係数行列 A が正則
    - 解は唯一存在する:　$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$
  - 係数行列 A が特異かつ $\boldsymbol{b} \in \mathrm{Ran}(A) := \{A\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}\}$
    - $A\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{b}$ を満たす解 $\boldsymbol{x}_0$ が存在する. また,
      $\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} \in \mathrm{Ker}(A) := \{\boldsymbol{x} | A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\}$ も解である.
  - 係数行列 A が特異かつ
    - 解は存在しない.　$\boldsymbol{b} \notin \mathrm{Ran}(A) := \{A\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}\}$

連立一次方程式の数値解法

連立一次方程式の数値解法

連立一次方程式の分類と解

- 係数行列 A が正則
  - 解は唯一存在する: $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$

- $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$ の（数学的な）計算法
  - 逆行列を陽的に計算

$$C = A^{-1} \to \boldsymbol{x} = C\boldsymbol{b}$$

  - Cramerの公式

$$x_i = \frac{\det A_i}{\det A} \qquad A_i = [\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{i-1}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{a}_{i+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n]$$

- どちらも計算量が多すぎるため行うべきではない

ここでの「陽的に計算」とは、Cを2次元配列として計算して保持したのち、Cとbの積を計算するという意味。

連立一次方程式の数値解法

- 直接法と反復法
  - 直接法：有限回の演算で解を計算

$$A\boldsymbol{x} = b \;\Longrightarrow\; \boldsymbol{x}$$

  - 係数行列の分解に基づく

  - 反復法：解に収束する近似解列を逐次的に生成

$$\boldsymbol{x}_0 \Rightarrow \boldsymbol{x}_1 \Rightarrow \boldsymbol{x}_2 \Rightarrow \cdot\ \cdot\ \cdot \Rightarrow \boldsymbol{x}_{k\text{-}1} \Rightarrow \boldsymbol{x}_k \approx \boldsymbol{x}$$

  - 定常反復法（Jacobi法など）
  - Krylov部分空間法（共役勾配法など）
  - その他

直接法には後述するガウスの消去法やLU分解を用いた方法などがある。

本講義では直接法について説明する。

連立一次方程式の数値解法

- Gaussの消去法
  - 行列の基本変形（行の定数倍と和）により

$$\left\{\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ & & & & \vdots & & & & \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}\right.$$

  を上三角化する
  - 1行目を $-\dfrac{a_{21}}{a_{11}}$ 倍し、２行目に加える→(2,1)要素がゼロに

$$\left\{\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ \boxed{\text{ゼロ}} & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ & & & & \vdots & & & & \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}\right.$$

連立一次方程式の数値解法

- **Gaussの消去法**
  - 行列の基本変形（行の定数倍と和）により

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
\vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n
\end{cases}
$$

を上三角化する

  - 1ステップ目（1列目の2行目以降を消去）

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
\qquad a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\
\qquad \vdots \\
\qquad a_{n2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)}
\end{cases}
$$

ゼロ

前ページと同様に、一番下の行まで1列目の項をゼロにしていく。

連立一次方程式の数値解法

- Gaussの消去法
  - 行列の基本変形（行の定数倍と和）により

$$
\left\{
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\
 & & & & \vdots & & & & \\
a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}
\right.
$$

  を上三角化する
  - 2ステップ目（2列目の3行目以降を消去）

$$
\left\{
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
 & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
\boxed{\text{ゼロ}} & & \boxed{\text{ゼロ}} & & \vdots & & & & \\
 & & & & & & a_{nn}^{(3)}x_n & = & b_n^{(3)}
\end{array}
\right.
$$

連立一次方程式の数値解法

- Gaussの消去法
  - 行列の基本変形（行の定数倍と和）により

$$
\left\{
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\
 & & & & \vdots & & & & \\
a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}
\right.
$$

  を上三角化する

  - n-1ステップ目（n-1列目のn行目を消去）

$$
\left\{
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
 & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
 & & & & \vdots & & & & \\
 & & & & & & a_{nn}^{(n)}x_n & = & b_n^{(n)}
\end{array}
\right.
$$

ゼロ

連立一次方程式の数値解法

後退代入

- 上三角化された連立一次方程式を、x_nから順に後退方向に代入し解く

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 + \cdots + a_{1,n-1}x_{n-1} + a_{1n}x_n = b_1 \\
\vdots \\
a_{n-1,n-1}^{(n-1)}x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)}x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \\
a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)}
\end{cases}
$$

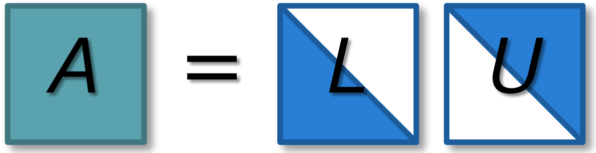
- $x_n = b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)}$
- $x_{n-1} = (b_{n-1}^{(n-1)} - a_{n-1,n}^{(n-1)}x_n)/a_{n-1,n-1}^{(n-1)}$

- $x_k = (b_k^{(k)} - a_{k,k+1}^{(k)}x_{k+1} - \cdots - a_{k,n}^{(k)}x_n)/a_{kk}^{(k)}$

連立一次方程式の数値解法

- LU分解
  - 係数行列 A を2つの行列 L と U の積

$$A = LU$$



に分解する

  - L: 対角要素が全て1の下三角行列
（下三角行列：対角より上の要素が全てゼロの行列）

  - U: 上三角行列（対角より下の要素が全てゼロの行列）

連立一次方程式の数値解法

- LU分解による連立一次方程式の求解
  - 係数行列 A のLU分解を用いると、連立一次方程式は

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Longrightarrow \quad LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

  と表される

  - ここで、$\boldsymbol{y} = U\boldsymbol{x}$ と置くと

$$L(U\boldsymbol{x}) = L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$$

  となり、この方程式を y について解き、次いで以下を解く

$$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$$

  - L, Uは三角行列であるため、前進・後退代入を用いて、簡単に解くことができる

連立一次方程式の数値解法

- LU分解の計算法
  - Gaussの消去法の行列形式での表現（に近い）
  - 行列 $P_{ij}(\alpha), i \neq j$ を

$$P_{ij}(\alpha) := I + \alpha \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}$$

と置く. ここで, I は単位行列、$\boldsymbol{e}_i$ は単位ベクトルである

  - A の第 j 行に α をかけて、第 i 行に加える操作

$$P_{ij}(\alpha)A = A + \alpha \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}} A$$

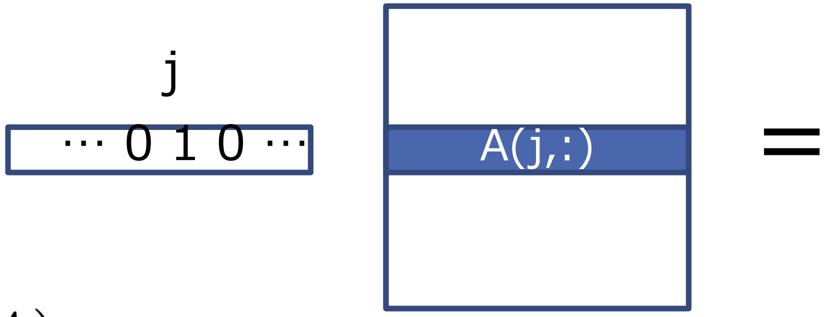
Aの第 j 行目を取り出す

i行目に第 j 行目の値を並べる

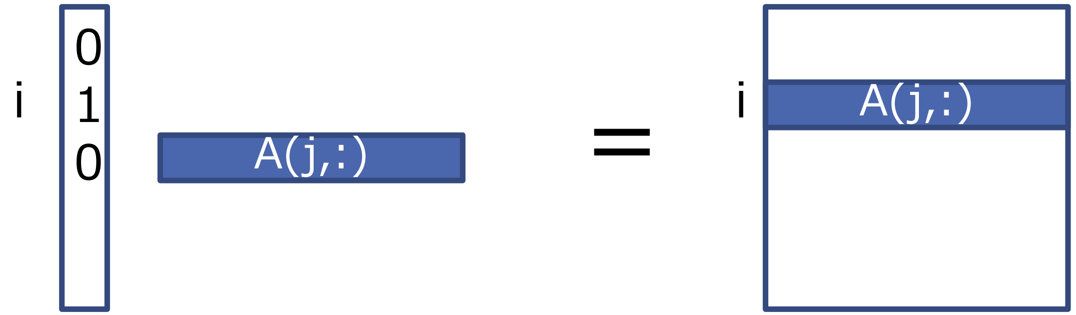
連立一次方程式の数値解法

LU分解の計算法

- $\boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}} A$

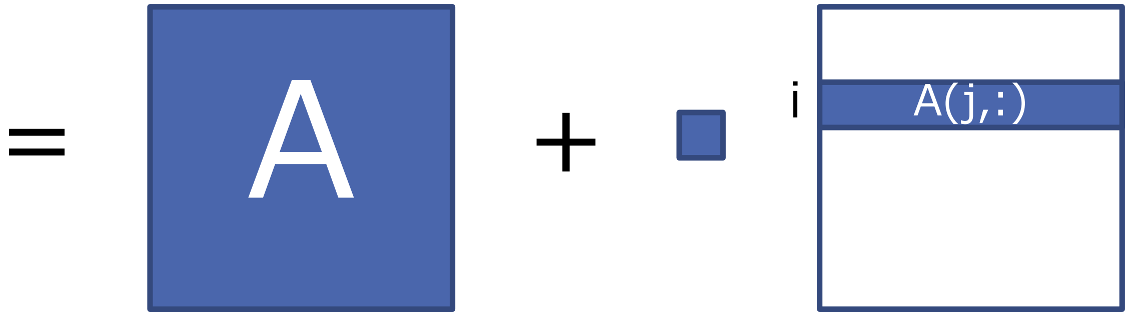


- $\boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}} A)$



連立一次方程式の数値解法

- LU分解の計算法
  - $P_{ij}(\alpha)A = A + \alpha \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}} A$



A の第 j 行に α をかけて、
第 i 行に加える操作

連立一次方程式の数値解法

LU分解の計算法

- A に対し, $P_{ij}(\alpha)$ を左から順に作用させることで、
  上三角行列 U を生成する
  （Gaussの消去法と同じ手順）

$$P^{(k)}(\alpha^{(k)}) \cdots P^{(1)}(\alpha^{(1)}) A = U$$

- 作用させた $P_{ij}(\alpha)$ の積（の逆行列）から下三角行列
  L が生成される

$$A = \left(P^{(k)}(\alpha^{(k)}) \cdots P^{(1)}(\alpha^{(1)}) \right)^{-1} U = LU$$

連立一次方程式の数値解法

- LU分解の計算法
  - 具体例

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\boxed{\alpha_{21} = -\frac{a_{21}}{a_{11}}}$$

  - (2,1)要素の消去： $P_{2,1}(-1/2)$ を A に左からかける
  - (3,1)要素の消去：さらに $P_{3,1}(1/2)$ を左からかける

$$\boxed{\alpha_{31} = -\frac{a_{31}}{a_{11}}}$$

  - 以上の操作を以下のように書く

$$M^{(1)} = P_{3,1}(1/2)P_{2,1}(-1/2)$$

$$A^{(1)} = P_{3,1}(1/2)P_{2,1}(-1/2)A = M^{(1)}A$$

連立一次方程式の数値解法

- LU分解の計算法
  - つづき
    - 同様に、第2列の消去を行う行列を $M^{(2)}$ とし、消去後の行列を
      $$A^{(2)} = M^{(2)}A^{(1)} = M^{(2)}M^{(1)}A$$
      とする. ここで, $A^{(2)}$ は上三角行列となる.
    - $U = A^{(2)} = M^{(2)}M^{(1)}A$　および　$L = (M^{(2)}M^{(1)})^{-1}$

      と置くと,
      $$A = (M^{(2)}M^{(1)})^{-1}U = LU$$
      と表される.
    - Pij (i > j)は下三角行列なので、Lは下三角行列になる

αの値はA(1)から決定する

連立一次方程式の数値解法

LU分解の計算法

- 注意
  - 実際にLU 分解を行うときには，行列 $P_{ij}(\alpha)$ を陽に A にかけるような計算は行わず，行同士の消去の計算を行う．
  - また，L の計算でも $M^{(1)}$ などの逆行列を計算することはしない．

- 代わりに行列 $P_{ij}(\alpha)$ の性質を利用する

$$P_{ij}^{-1}(\alpha) = \boxed{\quad ? \quad}$$

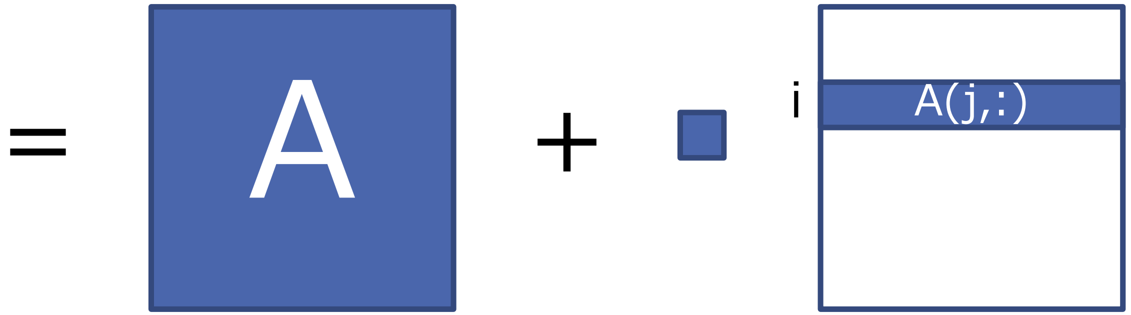
$$P_{i'j}(\alpha')P_{ij}(\alpha) = \boxed{\quad ? \quad}$$

P_ijの性質を利用すると P_ijの逆行列とベクトルの積は簡単に計算できる。

どのように計算するのだろうか？

連立一次方程式の数値解法（再掲）

- LU分解の計算法
  - $P_{ij}(\alpha)A = A + \alpha \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}} A$



先ほど示したスライドの式を思い出す。

A の第 j 行に α をかけて、
第 i 行に加える操作

連立一次方程式の数値解法

- LU分解の計算法
  - 注意
    - 実際にLU 分解を行うときには，行列 $P_{ij}(\alpha)$ を陽に A にかけるような計算は行わず，行同士の消去の計算を行う．
    - また，L の計算でも $M^{(1)}$ などの逆行列を計算することはしない．
  - 代わりに行列 $P_{ij}(\alpha)$ の性質を利用する

$$P_{ij}^{-1}(\alpha) = P_{ij}(-\alpha) = I - \alpha \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}$$

$$P_{i'j}(\alpha')P_{ij}(\alpha) = I + (\alpha \boldsymbol{e}_i + \alpha' \boldsymbol{e}_{i'})\boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}$$

実はPijに-αを入れたものがαを入れたものの逆行列になる。実際にかけて単位行列になるか確かめてみると良い。

また。異なるα、iのPijの積はこのように表すことができる。

連立一次方程式の数値解法

- 前進・後退代入
  - 具体例　$A\,x = L\,U\,x = b$

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ -1/2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 3/2 & -3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

  - Step 1

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ -1/2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

  - Step 2

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 3/2 & -3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

連立一次方程式の数値解法

- 前進・後退代入
  - 前進代入

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ -1/2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

  - *y1, y2, y3*の順に代入計算する

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_2 = b_2 - 1/2y_1 \\ y_3 = b_3 + 1/2y_1 - y_2 \end{cases}$$

$$\boxed{y_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \right), \quad i = 1, 2, \ldots, n}$$

連立一次方程式の数値解法

- 前進・後退代入
  - 後退代入

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 3/2 & -3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

  - *x3, x2, x1*の順に代入計算する

$$\begin{cases} x_3 = y_3 \\ x_2 = (y_2 + 3/2x_3)/(3/2) \\ x_1 = (y_1 - x_2 - x_3)/2 \end{cases}$$

$$\boxed{x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j \right) \times \frac{1}{u_{ii}}, \quad i = n, n-1, \ldots, 1}$$

連立一次方程式の数値解法

前進・後退代入

- 一般に行列の次元が n の場合、*L y* = *b* の解 *y* = [*y1*, *y2*, ⋯, *yn*]^Tは以下で求められる

$$y_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \right), \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

- また、方程式 *U x* = *y* の解 *x* = [*x1*, *x2*, ⋯, *xn*]^T は以下で求められる

$$x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j \right) \times \frac{1}{u_{ii}}, \quad i = n, n-1, \ldots, 1$$