

1 連立一次方程式

非線型方程式に対するニュートン法は**反復法**の一種であった。反復法は無限に繰り返せば真の解に到達する手順を要求される精度に見合った反復する方法である。それに対して、直接的に解を求める方法を**直接法**と言う。

真に直接的に解けるのは一次方程式、精々が連立一次方程式までである。故に、微分方程式の解などの直接法は殆どのものが連立一次方程式を解く事に帰着して解かれる。一般に、その様に非線形な問題を近似する事によって与えられた連立一次方程式は次元が極めて高い。実際、反復法において反復回数と打ち切り誤差がトレード・オフの関係である様に、直接法においては次元と打ち切り誤差がトレード・オフの関係であると言える。

つまり、(高次元) 連立一次方程式の解法¹は基本的であるのに止まらず、きわめて有用な技術である。

1.1 解の存在

連立一次方程式,

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

を解くことを考えよう。この方程式は行列の表現を使えば

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

と書ける。 $\mathbf{A} := (a_{ij})$, $\mathbf{b} := (b_i)$, $\mathbf{x} := (x_i)$ として

$$\mathbf{b} = \mathbf{Ax}$$

であるから、逆行列 $\mathbf{A}^{-1}$ を求める事ができれば

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

で与えられる。特に次の定理が逆行列の存在を保証してくれる。

定理 1. $|\mathbf{A}| \neq 0$ の時, 逆行列 $\mathbf{A}^{-1}$ が存在する。

¹高次元の場合, 現実問題として, 計算機の使用はもはや必須条件である。

$$\mathbf{A}^{-1} = \left(\frac{|\mathbf{B}_{ij}|}{|\mathbf{A}|} \right)_{ij} \quad (\mathbf{B}_{ij} \text{ は } \mathbf{A} \text{ の } (i, j)\text{-余因子})$$

この公式を用いれば”原理的には”一般的に逆行列を求める事ができ、方程式 $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ の解を求める事ができる. しかし, この公式は (特に高次元の場合) 解法としては適さない. 行列式は n 次置換 $\mathfrak{S}_n$ を使って一般的に

$$|\mathbf{A}| = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_n} \text{sign } \sigma \prod_{i=1}^n a_{\sigma(i)i}$$

1.2 ガウスの消去法

まずは具体的に解くところを見てみよう.

$$\begin{cases} x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 10 & \textcircled{1} \\ 2x_1 + x_2 + 5x_3 = 7 & \textcircled{2} \\ 6x_1 + 5x_2 + x_3 = 11 & \textcircled{3} \end{cases}$$
$$\begin{cases} x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 10 & \textcircled{4} \\ -5x_2 - 3x_3 = -13 & \textcircled{5} \\ -13x_2 - 23x_3 = -49 & \textcircled{6} \end{cases}$$
$$\left\{ \begin{array}{lcl} x_1 & + \frac{11}{5} x_3 & = 11/5 & \textcircled{7} \\ & x_2 + \frac{3}{5} x_3 & = 13/5 & \textcircled{8} \\ & -\frac{76}{5} x_3 & = -76/5 & \textcircled{9} \end{array} \right.$$
$$\begin{cases} x_1 & = & 0 & \textcircled{10} \\ x_2 & = & 2 & \textcircled{11} \\ x_3 & = & 1 & \textcircled{12} \end{cases}$$

2

但し、この素朴な方法では、 k 列目の掃き出しを行う時の k 列目の係数 (例えば ⑤ における -5) が 0 である場合、0 での除算を行う事になり破綻する。

一般的にしようと思えば、 k 列目の掃き出しに使う行を k 列目の係数が 0 でない様に選ぶ必要がある。

例 2.

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \text{①} \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 9 & \text{②} \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 & \text{③} \end{cases}$$

④ := ①, ⑤ := ② - 2 × ①, ⑥ := ③ - 2 × ① とすれば

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \text{④} \\ & -3x_3 = -9 & \text{⑤} \\ & -x_2 - 3x_3 = -11 & \text{⑥} \end{cases}$$

⑤ の x_2 の係数が 0 であるから 0 より”下の列”(未だ掃き出しに用いていない列) で x_2 の係数が非 0 の列⑥と入れ替える。即ち、④' := ④, ⑤' := ⑥, ⑥' := ⑤ として

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \text{④'} \\ & -x_2 - 3x_3 = -11 & \text{⑤'} \\ & -3x_3 = -9 & \text{⑥'} \end{cases}$$

⑧ := -⑤', ⑦ := ④' - ⑧, ⑨ := ⑥' とすれば

$$\begin{cases} x_1 & -x_3 = -2 & \text{⑦} \\ & x_2 + 3x_3 = 11 & \text{⑧} \\ & -3x_3 = -9 & \text{⑨} \end{cases}$$

⑫ := $-\frac{1}{3} \times \text{⑨}$, ⑩ := ⑦ + ⑫, ⑪ := ⑧ - 3 × ⑫ とすれば

$$\begin{cases} x_1 & & = 1 & \text{⑩} \\ & x_2 & = 2 & \text{⑪} \\ & & x_3 = 3 & \text{⑫} \end{cases}$$

実質、係数と右辺に関する計算に終始するので、 $n \times (n+1)$ 行列についての次のような手順で計算が出来る。

掃き出し法

先ず $\mathbf{C}^{(1)} := (\mathbf{A}, \mathbf{b})$ とし、 $k = 1, \dots, n$ について $\mathbf{C}^{(k)}$ から $\mathbf{C}^{(k+1)}$ を次の様に求める;

1. k 行目以降の $\mathbf{C}^{(k)}$ の k 列目の値 $c_{kk}^{(k)}, \dots, c_{nk}^{(k)}$ の絶対値が最も大きい (0 でない^a) 行を探す。
2. 前項で見つけた i_k 行目と k 行目の行を全部入れ替える。
3. 新しい k 行目を使って他の k 列目の値を掃き出す。

以上を繰り返して出来た $\mathbf{C}^{(n+1)}$ の $n+1$ 列目が方程式の解である。

^a理屈上は 0 でない行ならばどこでもいいが、計算機に必然的に発生する誤差のためにぴったり 0 か否かの判定は不可能である。そこで、”もっとも 0 から離れた値”をとる行を使う。

上述の掃き出し法では乗算の数はおよそ $n^3/2$ である。この方法はやや冗長

であり、次の様に三角行列にした後、後ろから順に代入 (後退代入) して解を求めるのがガウスの消去法である。

例 3.

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \textcircled{1} \\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 9 & \textcircled{2} \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 & \textcircled{3} \end{cases}$$

$\textcircled{4} := \textcircled{1}$, $\textcircled{5} := \textcircled{2} - 2 \times \textcircled{1}$, $\textcircled{6} := \textcircled{3} - 2 \times \textcircled{1}$ とすれば

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \textcircled{4} \\ & -3x_3 = -9 & \textcircled{5} \\ & -x_2 - 3x_3 = -11 & \textcircled{6} \end{cases}$$

$\textcircled{5}$ の x_2 の係数が 0 であるから 0 より”下の列”(未だ掃き出しに用いていない列) で x_2 の係数が非 0 の列 $\textcircled{6}$ と入れ替える。即ち, $\textcircled{4}' := \textcircled{4}$, $\textcircled{5}' := \textcircled{6}$, $\textcircled{6}' := \textcircled{5}$ として

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \textcircled{4}' \\ & -x_2 - 3x_3 = -11 & \textcircled{5}' \\ & & -3x_3 = -9 & \textcircled{6}' \end{cases}$$

$\textcircled{7} := \textcircled{4}' - \textcircled{5}$, $\textcircled{9} := \textcircled{6}'$ とすれば

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \textcircled{4}' \\ & x_2 + 3x_3 = 11 & \textcircled{7} \\ & & -3x_3 = -9 & \textcircled{8} \end{cases}$$

$\textcircled{9} := -\frac{1}{3} \times \textcircled{8}$ とすれば

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \textcircled{4}' \\ & x_2 + 3x_3 = 11 & \textcircled{7} \\ & & x_3 = 3 & \textcircled{9} \end{cases}$$

x_3 から順に代入していけば,

$$\begin{aligned} x_3 &= 3 \\ x_2 &= 11 - 3 \times 3 = 2 \\ x_1 &= 9 - (1 \times 2 + 2 \times 3) = 1 \end{aligned}$$

—— ガウスの消去法 ——

先ず $\mathbf{C}^{(1)} := (\mathbf{A}, \mathbf{b})$ とし, $k = 1, \dots, n$ について $\mathbf{C}^{(k)}$ から $\mathbf{C}^{(k+1)}$ を次の様に求める;

1. k 行目以降の $\mathbf{C}^{(k)}$ の k 列目の値 $c_{kk}^{(k)}, \dots, c_{nk}^{(k)}$ の絶対値が最も大きい行を探す.
2. 前項で見つけた i_k 行目と k 行目の行を全部入れ替える.
3. 新しい k 行目を使って $k+1, \dots, n$ 行目の k 列目の値を掃き出す.

以上を繰り返して出来た $\mathbf{C}^{(n+1)} = (\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{b}})$ をつかって $x_n = \tilde{b}_n$ から $k = n-1, \dots, 1$ の順に

$$x_k = \tilde{b}_k - (\tilde{a}_{k,k+1}x_{k+1} + \dots + \tilde{a}_{k,n}x_n)$$

によって x_k が得られる.

掃き出し回数が減るので乗算の数はおよそ $n^3/3$ となる.

$|\mathbf{A}| \neq 0$ なる係数行列を持つ連立一次方程式が掃き出し法によって必ず解ける事を証明しよう.

定理 2. $|\mathbf{A}| \neq 0$, $\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{A}$ とする. $\sigma_k \geq k$ を適当に取れば次の様にして $\mathbf{A}^{(k)}$ が帰納的に well defined である. (即ち, $\hat{a}_{kk}^{(k)} = a_{\sigma_k k}^{(k)} \neq 0$ なる $\sigma_k \geq k$ が取れる)

$$p_{ij}^{(k)} := \begin{cases} 1 & \text{if } i = j \neq k, \sigma_k \\ 1 & \text{if } (i, j) = (k, \sigma_k) \text{ or } (i, j) = (\sigma_k, k) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \mathbf{P}^{(k)} := (p_{ij}^{(k)}), \quad (\hat{a}_{ij}^{(k)}) := \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)}$$

$$m_{ij}^{(k)} := \begin{cases} 1/\hat{a}_{kk}^{(k)} & \text{if } i = j = k \\ -\hat{a}_{ik}^{(k)}/\hat{a}_{kk}^{(k)} & \text{if } i \neq k, j = k \\ 1 & \text{if } i = j \neq k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \mathbf{M}^{(k)} := (m_{ij}^{(k)}), \quad \mathbf{A}^{(k+1)} := \mathbf{M}^{(k)} \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)}$$

また $\mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{I}$ となる.

note

σ_k は掃き出しに用いる行の選択であり, $\mathbf{P}^{(k)}$ はその行の入れ替えに相当し, $\mathbf{M}^{(k)}$ が実際の掃き出し操作に相当する.

特に $\mathbf{I} = \mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{M}^{(n)} \mathbf{P}^{(n)} \mathbf{M}^{(n-1)} \mathbf{P}^{(n-1)} \dots \mathbf{M}^{(1)} \mathbf{P}^{(1)} \mathbf{A}$, 即ち $\mathbf{M}^{(n)} \mathbf{P}^{(n)} \dots \mathbf{M}^{(1)} \mathbf{P}^{(1)} = \mathbf{A}^{-1}$ であり. 我々は $\mathbf{A}$ の逆行列を求めた事になる.

例 1 では掃き出しに用いる行が掃き出される列と常に等しく, $\sigma_k = k$. 即ち $\mathbf{P}^{(k)} = \mathbf{I}$ である. この時 $\mathbf{M}^{(n)} \dots \mathbf{M}^{(1)} = \mathbf{A}^{-1}$ となり,

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

に次々に両辺に掃き出し操作 $\mathbf{M}^{(k)}$ を作用させる事によって.

$$\mathbf{b}^{(n)} = \mathbf{A}^{(n+1)} \mathbf{x} = \mathbf{I} \mathbf{x} = \mathbf{x}$$

の形を導いた.

Proof. 特に $\mathbf{A}^{(k)}$ まで well def で $\mathbf{A}^{(k)}$ が次の形をしている

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{k-1} & * \\ 0 & \end{pmatrix} \quad (1)$$

事を帰納的に示す. ここで $\mathbf{I}_{k-1}$ は $(k-1) \times (k-1)$ 単位行列を表す.

定義より $|\mathbf{M}^{(l)}| = 1/\hat{a}_{ll}^{(l)}$, $|\mathbf{P}^{(l)}| = 1$, $|\mathbf{A}^{(k)}| = |\mathbf{M}^{(k)}| |\mathbf{P}^{(k)}| \dots |\mathbf{M}^{(1)}| |\mathbf{P}^{(1)}| |\mathbf{A}^{(1)}|$ であるから, 正規性の仮定 $|\mathbf{A}^{(1)}| \neq 0$ より $|\mathbf{A}^{(k)}| \neq 0$. 一方で行列式の定義から

$$|\mathbf{A}^{(k)}| = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_n} \text{sign } \sigma \prod_{i=1}^n a_{\sigma(i)i}^{(k)}$$

であるから, $\prod_{i=1}^n a_{\sigma(i)i}^{(k)} \neq 0$ となる $\sigma^{(k)} \in \mathfrak{S}_n$ が少なくとも 1 つは存在する. 更に (1) より $(\sigma^{(k)}(1), \sigma^{(k)}(2), \dots, \sigma^{(k)}(k)) = (1, 2, \dots, k)$ で無ければならない. この時 $\sigma^{(k)}(k) \geq k$ かつ $a_{\sigma^{(k)}(k)k}^{(k)} \neq 0$ であるから $\sigma_k := \sigma^{(k)}(k)$ と置けば $\mathbf{P}^{(k)}, \mathbf{M}^{(k)}$ が well def.

次に $\mathbf{P}^{(k)}$ の初めの $k-1$ 列が単位行列と同じである事に注意すれば, $\mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)}$ の初めの k 列は $\mathbf{A}^{(k)}$ のものと同じ, i.e., $\mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)}$ が

$$\mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} & \hat{a}_{1k}^{(k)} & \\ \mathbf{I}_{k-1} & \vdots & * \\ 0 & \hat{a}_{nk}^{(k)} & \end{pmatrix}$$

の形をしている事がわかる. 更に $\mathbf{M}^{(k)}$ の定義から

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{M}^{(k)} \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} & 0 & \\ & \vdots & \\ \mathbf{I}_{k-1} & 0 & \\ & 1 & * \\ & 0 & \\ 0 & \vdots & \\ & 0 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_k & \\ 0 & * \end{pmatrix}$$

も容易に導かれる. □

問 1. $|\mathbf{A}| \neq 0$ なる係数行列を持つ連立一次方程式がガウスの消去法によって必ず解ける事を証明せよ.