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だけ反復する方法である。得られる解はあくまで無限を有限で近似することによって得られる間接的なものである為、この種の方法を間接法と呼ぶ。(同じ手順を反復するという部分に注目して反復法とも呼ばれる。) 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

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

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。

よく知られたこの定理の証明はクラメル公式

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

により逆行列を構成するものである。

クラメル公式は逆行列を求める一般的な方法を与えており、この公式を用いれば方程式 $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ の解を“原理的には”求める事が可能である。しかし、この公式は(特に高次元の場合)数値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。

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

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

1. k 行目以降の $C^{(k)}$ 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 σ_k を探す。(つまり $l = k, k+1, \dots, n$ について $|c_{\sigma_k k}^{(k)}| \geq |c_{lk}^{(k)}|$ となる様な σ_k を探す)
2. 前項で見つけた σ_k 行目と k 行目の行を全部入れ替える。即ち、 $1 \leq i, j \leq n$ について、

$$\hat{c}_{ij}^{(k)} := \begin{cases} c_{\sigma_k j}^{(k)} & i = k \text{ のとき} \\ c_{kj}^{(k)} & i = \sigma_k \text{ のとき} \\ c_{ij}^{(k)} & \text{その他のとき} \end{cases}$$

3. 新しい k 行目を使って他の k 列目の値を掃き出す。即ち、 $1 \leq i, j \leq n$ について、

$$c_{ij}^{(k+1)} := \begin{cases} \hat{c}_{ij}^{(k)} / \hat{c}_{kk}^{(k)} & i = k \text{ のとき} \\ \hat{c}_{ij}^{(k)} - \frac{\hat{c}_{ik}^{(k)}}{\hat{c}_{kk}^{(k)}} \hat{c}_{kj}^{(k)} & \text{その他のとき} \end{cases}$$

以上を繰り返して出来た $C^{(n+1)}$ 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”をとる行を使う事により 0 の判定を回避する。後述するように $|A| \neq 0$ の場合必ず真に正の行が存在する。

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.

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

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

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

⑦ := ④' - ⑥', ⑧ := ⑥' とすれば

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

⑨ := $-\frac{1}{3} \times$ ⑧ とすれば

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 9 & \text{④}' \\ x_2 + 3x_3 = 11 & \text{⑦} \\ x_3 = 3 & \text{⑫} \end{cases}$$

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

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

1. k 行目以降の $C^{(k)}$ の k 列目の値 $c_{kk}^{(k)}, \dots, c_{nk}^{(k)}$ の絶対値が最も大きい行 σ_k を探す.
2. 前項で見つけた σ_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 $C^{(n+1)} = (\tilde{A}, \tilde{b})$ をつかって $x_n = \tilde{b}_n$ から $k = n-1, \dots, 1$ の順に

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

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.

1.3 解法の正当性

正則な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.

掃き出し法が破綻するのは「 k 列目の掃き出しの時に k 行目の値が全て 0」の時であり, 係数行列が正則 ($|A| \neq 0$) ならばこれがおきない事を示す.

命題 1. $|A| \neq 0$ ならば $\max_k |a_{k1}| > 0$

Proof.

$$|A| = \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} a_{k1} |B_{k1}| \quad (B_{k1} \text{ は } A \text{ の } (k, 1)\text{-余因子})$$

であるので少なくとも一つの k で $a_{k1} \neq 0$. □

$A^{(k)}$ が正則で

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} I_{k-1} & B^{(k)} \\ 0 & C^{(k)} \end{pmatrix} \quad (1)$$

の形をしているとする.

$|C^{(k)}| = |A^{(k)}| \neq 0$ より $\max_{1 \leq l \leq n-k+1} |c_{l1}^{(k)}| = \max_{k \leq l \leq n} |a_{lk}^{(k)}| > 0$ を満たしていることに注意し, $k \leq$

$\sigma_k \leq n$ を $a_{\sigma_k k}^{(k)} \neq 0$ なる行とする.

$P^{(k)}, \hat{A}^{(k)}, M^{(k)}, A^{(k+1)}$ を順に次の様に定める

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

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

命題 2. $\mathbf{A}^{(k+1)}$ も正則で

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_k & \mathbf{B}^{(k+1)} \\ 0 & \mathbf{C}^{(k+1)} \end{pmatrix} \quad (2)$$

の形をしている。

note

σ_k は掃き出しに用いる行であり, $\mathbf{P}^{(k)}$ 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。

note

特に $\mathbf{A}$ が正則であれば $\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{A}$ から順に $\mathbf{A}^{(k+1)}$ 定義していく事が可能で, $\mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{I}$ となる。よって $\mathbf{I} = \mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{M}^{(n)} \mathbf{P}^{(n)} \mathbf{M}^{(n-1)} \mathbf{P}^{(n-1)} \dots \mathbf{M}^{(1)} \mathbf{P}^{(1)} \mathbf{A}$, 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。

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

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

$$\mathbf{M}^{(n)} \mathbf{P}^{(n)} \dots \mathbf{M}^{(1)} \mathbf{P}^{(1)} \mathbf{b} = \mathbf{M}^{(n)} \mathbf{P}^{(n)} \dots \mathbf{M}^{(1)} \mathbf{P}^{(1)} \mathbf{A}^{(1)} \mathbf{x} = \mathbf{I} \mathbf{x} = \mathbf{x}$$

を得る。掃き出し法は $n \times (n+1)$ 行列 $\mathbf{C} := (\mathbf{A}, \mathbf{b})$, つまり $\mathbf{A}$ 及び $\mathbf{b}$ に同じ操作をしており, 正にこの計算によって解を求めている。

Proof. 定義より $|\mathbf{M}^{(k)}| = 1/\hat{a}_{kk}^{(k)} = 1/a_{\sigma_k k}^{(k)} \neq 0$, $|\mathbf{P}^{(k)}| = 1$, であるから, 正規性の仮定 $|\mathbf{A}^{(k)}| \neq 0$ より $|\mathbf{A}^{(k+1)}| = |\mathbf{M}^{(k)} \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)}| = |\mathbf{M}^{(k)}| |\mathbf{P}^{(k)}| |\mathbf{A}^{(k)}| \neq 0$.

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 $k-1$ 列は $\mathbf{A}^{(k)}$ のものと同じ, i.e., $\mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)}$ が

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

の形をしている事, 特に

$$((\mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)})_{kl})_{l=1}^n = \underbrace{(0, \dots, 0)}_{k-1}, \hat{a}_{kk}^{(k)}, *, \dots, *$$

であることがわかる。更に $\mathbf{M}^{(k)}$ の定義から

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

が得られる。 □