応用数理実験 B No.1 **連立一次方程式に対する直接法**

桂田 祐史

2018 年 8 月 22 日

1 講義の内容のまとめ・補足

連立一次方程式 $Ax = b$ の解法としては、**直接法**の範囲では、係数行列の **LU 分解**を経由する方法を採用すべきである。LU 分解のアルゴリズムとしては **Gauss の消去法** (**Gaussian elimination**) が良い[1]。係数行列が一般の N 次正方行列である場合、計算に必要な乗除算の回数は $N^3/3$ 程度である[2]。

連立一次方程式は K ($K = \mathbf{R}, \mathbf{C}$) 上で考えれば有限回の演算で解が求まるが、計算機上の計算では、普通は浮動小数点数を使わねばならないので、近似解 x_* しか求められないことが多い。$x - x_*$ を**誤差** (**error**), $b - Ax_*$ を**残差** (**residual**) という。

誤差の解析には**ノルム** (**norm**) の概念が有用である。

ベクトル空間 K^N のノルムには色々なものがあるが、どの二つも互いに**同値**である[3]。特によく使われるものとして、

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{N} |x_i|^p\right)^{1/p}, \qquad \|x\|_\infty = \max_{i=1,\cdots,N} |x_i|$$

などがある (ここで $1 \le p < \infty$)。

N 次正方行列の空間 $M(N; K)$ のノルムとして、ベクトルのノルムから導かれる**作用素ノルム** (ナチュラル・ノルム、付随するノルム、ともいう)

$$\|A\| = \sup_{\|x\| \ne 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

を採用すると、

$$\|AB\| \le \|A\|\,\|B\|, \quad \|I\| = 1, \quad \|Ax\| \le \|A\|\,\|x\|$$

等の公式が成り立ち、便利である。

練習問題: ベクトル $x = (x_1, x_2, \cdots, x_N)$ ノルムとして、ℓ^1-ノルム $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{N} |x_i|$ を採用した場合、行列 $A = (a_{ij})$ の作用素ノルム $\|A\|_1$ は $\|A\|_1 = \max_{1 \le k \le N} \sum_{i=1}^{N} |a_{ik}|$ となる。

正則行列 A に対して、A の**条件数** (**condition number**) $\mathrm{cond}(A)$ を次式で定義する:

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|.$$

---

[1] 先週は説明しなかったが LU 分解のアルゴリズムとして、 Crout (クラウト) 法という方法も同程度の効率を持っている。また係数行列が正定値の場合は Cholesky(コレスキー) 法という方法もある。しかし、いかなる場合も Gauss の消去法はこれらの方法と同程度以上の効率を持つ (少なくとも大きく劣ることはない)。

[2] 係数行列が対称行列である場合には $N^3/6$ 程度、三重対角行列である場合には $O(N)$ で済ませるような工夫が可能である。

[3] もっともノルムの同値性の定義式 ($\exists c_1 > 0, \exists c_2 > 0$ s. t. $c_1\|x\|' \le \|x\| \le c_2\|x\|' \quad (x \in K^N)$) に現れる定数 c_1, c_2 の値は結構大事である。特に N が大きい場合は、どのノルムで議論しているか注意を要する。

行列の条件数は、それがどれくらい特異行列に近いか、それを係数行列とする連立一次方程式を解いた場合にどれくらい丸め誤差が生じ易いか、の目安となる量である。条件数が 1 より極端に大きい時は、大きな丸め誤差が発生する可能性があり、**悪条件** (**ill-conditioned**) であると言う。

枢軸 (pivot) の部分選択法 (**partial pivoting**) を行う Gauss の消去法では、ほとんどすべての場合に、相対残差が小さいことは保証される (**計算機イプシロン**程度である) が、残差が小さくても丸め誤差は大きくなりうる。係数行列の条件数が小さい時は、誤差が小さいことが保証される。

2　プログラム・ライブラリィ

参考: LINPACK 用のサンプル・プログラム “`sample-by-LINPACK.f`” をコンパイルするには

```
f77o sample-by-LINPACK.f -llinpack -lblas
```

とすればよい。LINPACK のソースは “`/usr/local/lib/mathlib/LINPACK/linpack/`” にある。また BLAS のソースは “`/usr/local/lib/mathlib/BLAS/blas/`” にある。

3　勉強用参考書

名取亮、線形計算、朝倉書店 (1993)
戸川隼人、BASIC による線形代数、共立出版 (1985)