数値計算法

第九回
連立方程式と行列演算

若狭　智嗣

粒子物理学講座

復習ー数値微分と数値積分ー

- **数値微分(方程式)**
  - Euler法
    - 各ステップの誤差はTayler展開の2次
    - 全体の誤差は1次
  - Runge-Kutta法
    - 各ステップの誤差はTayer展開の5次
    - 全体の誤差は4次

- **数値積分**
  - 区分求積法
    - 各面積の誤差はTayler展開の2次
    - 全体の誤差は1次
  - 台形法
    - 各面積の誤差はTayer展開の3次
    - 全体の誤差は2次
  - Simpson法
    - 各面積の誤差はTayler展開の5次
    - 全体の誤差は4次

連立方程式と行列演算

- 次の連立方程式を数値計算により解くことを考える。

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

- 連立方程式を解くということは、係数行列 A 及びベクトル $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x}$ を

$$
A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}
$$

とおけば

$$
A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}
$$

連立方程式を解く ⇔ A の逆行列 A^{-1} を求める

筆算で行っていること

まず、我々が筆算で連立方程式を解くときに行っている事を整理する。具体的な例として、

$$
\begin{aligned}
2x - 1y - 1z &= +1 && (11.5)\\
3x - 2y + 2z &= -3 && (11.6)\\
1x - 2y + 1z &= -4 && (11.7)
\end{aligned}
$$

を考える。まず、式 (11.5) を用いて、式 (11.6)、(11.7) の x の係数を 0 にする。

$$
\begin{aligned}
2x - 1y - 1z &= +1 && \ldots(11.5) && (11.8)\\
0x - \frac{1}{2}y + \frac{7}{2}z &= -\frac{9}{2} && \ldots(11.6) - (11.5) \times \frac{3}{2} && (11.9)\\
0x - \frac{3}{2}y + \frac{3}{2}z &= -\frac{9}{2} && \ldots(11.7) - (11.5) \times \frac{1}{2} && (11.10)
\end{aligned}
$$

次に、式 (11.9) を用いて式 (11.10) の y の係数を 0 にする。

$$
\begin{aligned}
2x - 1y - 1z &= +1 && \ldots(11.5) && \textbf{\textit{x}}\text{ が求まる} && (11.11)\\
0x - \frac{1}{2}y + \frac{7}{2}z &= -\frac{9}{2} && \ldots(11.9) && \textbf{\textit{y}}\text{ が求まる} && (11.12)\\
0x + 0y - 9z &= +9 && \ldots(11.10) - (11.9) \times 3 && \textbf{\textit{z}}\text{ が求まる} && (11.13)
\end{aligned}
$$

Gaussの消去法ー数値計算による連立方程式の解法ー

- 係数行列 A と列ベクトル b からなる $n\times(n+1)$ の行列 $\tilde{A}$ を作る

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

- 行同士の線形演算により、**左下が0の行列**に変換する

$$\tilde{A}' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & \cdots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ 0 & 0 & a'_{33} & \cdots & a'_{3n} & b'_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a'_{nn} & b'_n \end{pmatrix}$$

x_1が求まる

x_nが求まる

- 最下行から順に上に行くと、x_n から x_1 が順次求められる。

演習　2元連立方程式を解くプログラム

- 以下の一般的な2元連立方程式を考える。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = a_{13} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = a_{23} \end{cases}$$

- 係数 a_{ij} を2次元配列で表すと、Fortran のプログラムは例えば以下の通り

```
      program renritsu
      implicit none
c
      integer N
      parameter(N=2)    ! 次元数
      real     a(N,N+1) ! 実際は2行3列
c begin:
      a(1,1) = 1.0
      ...
```

演習　2元連立方程式を解くプログラム

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = a_{13} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = a_{23} \end{cases}$$

・ $(2行目) - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}(1行目)$ を計算 → 2行目の x_1 の係数を0にする

元の値

共通

$$\boxed{a_{21}} = \boxed{0}$$

$$\boxed{a_{22}} = \boxed{a_{22}} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12}$$

$$\boxed{a_{23}} = \boxed{a_{23}} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{13}$$

新しい（計算した）値

一般的に

$$a_{2i} = a_{2i} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{1i}$$

$$i = 2 \sim 3(N+1)$$

注：$a_{21} = 0$ (計算後)

演習　2元連立方程式を解くプログラム

一般的に

$$a_{2i} = a_{2i} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{1i} \qquad i = 2 \sim 3(N+1)$$

Fortran で表すと

```
      integer i
C
      do i=2,N+1
         a(2,i) = a(2,i)-(a(2,1)/a(1,1))*a(1,i)
      end do
```

演習　解を求める

- ここまでで連立方程式は、2行目の x_1 の係数を0にしたので、

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = a_{13} \\ \qquad\quad a_{22}x_2 = a_{23} \end{cases}$$

- 解は

逆順に求まる

$$x_2 = \frac{a_{23}}{a_{22}}$$

$$x_1 = \frac{a_{13} - a_{12}x_2}{a_{11}}$$

一般的に

$$x_i = \frac{a_{i,N+1} - \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$

$$i = 1 \sim 2(N)$$

演習　解を求める

一般的に

$$x_i = \frac{a_{i,N+1} - \boxed{\sum_{j=i+1}^{N} a_{ij} x_j}}{a_{ii}} \quad i = 1 \sim 2(N)$$

```
      integer j   ! Doループ用
      real x(N)   ! 解が入る
c
      do i=N,1,-1    ! 逆順で求める
        x(i) = 0.0 ! 初期化
        do j=i+1,N
          x(i) = x(i) + a(i,j)*x(j)
        end do
        x(i) = (a(i,N+1)-x(i))/a(i,i)
      end do
```

演習

- 自作したプログラムを用いて、次の連立方程式を解け

$$\begin{cases} 109\boldsymbol{x} + 443\boldsymbol{y} = 755345 \\ 311\boldsymbol{x} + 251\boldsymbol{y} = 928449 \end{cases}$$

注:答えは整数であるが、数値計算の誤差により、
　　計算結果は整数から若干ずれる

・倍精度で計算するとどうなるか？
・整数と思って、検算してみよ。

プログラム(gauss)の説明
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/gauss.f)

```
      subroutine gauss(n,a,b)
      implicit none
c*****************************************
c Gaussの消去法によりn元連立方程式
c    Ax = b
c の解を求める。
c 入力
c    n: 次元
c    a: 係数行列Aの要素(n x n)
c    b: ベクトルbの要素(n)
c 出力
c    a: 行列Aを上三角行列に変換したもの
c       (左下の非対角要素は意味が無い)
c    b: 解x
c*****************************************
c input/output:
      integer n
      real    a(n,n),b(n)
```

***n* 行 *n* 列の行列要素**

***1* 行 *n* 列の行列要素**

プログラム(gauss)の説明(続き)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/gauss.f)

列に関するループ

行に関するループ

```
c begin:
      do i=1,n
        do j=i+1,n
          a(j,i)=a(j,i)/a(i,i)   ! Pivot:c=a_ji/a_ii
          do k=i+1,n
            a(j,k)=a(j,k)-a(j,i)*a(i,k)
          end do
            b(j)=b(j)-a(j,i)*b(i)
        end do
      end do
```

行同士の線形演算により、左下半分を0にしている

プログラム(gauss)の説明(3行3列の場合)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/gauss.f)

- 1st ステップ(i=1,j=2)

$$a'_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}}$$

$$a'_{22} = a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12}$$

$$a'_{23} = a_{23} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{13}$$

$$b'_2 = b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} b_1$$

要素は0
(中間変数として使用)

2nd ステップ(i=1,j=3)

$$a'_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}}$$

$$a'_{32} = a_{32} - \frac{a_{31}}{a_{11}} a_{12}$$

$$a'_{33} = a_{33} - \frac{a_{31}}{a_{11}} a_{13}$$

$$b'_3 = b_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}} b_1$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{ー(1行目)×}a_{31}/a_{11}]{\text{ー(1行目)×}a_{21}/a_{11}} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & b'_3 \end{pmatrix}$$

プログラム(gauss)の説明(3行3列の場合)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/gauss.f)

- 3rdステップ(i=2,j=3)

$$a''_{32} = \frac{a'_{32}}{a'_{22}}$$

$$a''_{33} = a'_{33} - \frac{a'_{32}}{a'_{22}} a'_{23}$$

$$b''_3 = b'_3 - \frac{a'_{32}}{a'_{22}} b'_2$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & b'_3 \end{pmatrix} \xrightarrow[-(2\text{行目})\times a'_{32}/a'_{22}]{} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & b'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & b''_3 \end{pmatrix}$$

プログラム(gauss)の説明(解を求める部分)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/gauss.f)

n 行目(x_n)から逆順に求める

計 n 個の解を求める

```
do i=n,1,-1
   do j=i+1,n
      b(i)=b(i)-a(i,j)*b(j)
   end do
   b(i)=b(i)/a(i,i)              ! Ax=b の解 x
end do
return
end
```

プログラム(gauss)の説明(3行3列の場合)
(/home/teacher/z5wt01in/SAMPLE/gauss.f)

- 1st ステップ(i=3)
  - i+1=4 > 3(=n)なので、jに関するループはまわらない(処理されない)

$$x_3 = b_3''' = \frac{b_3''}{a_{33}''}$$

- 2nd ステップ(i=2, j=3)

$$b_2'' = b_2' - a_{23}' b_3'''$$

$$x_2 = \frac{b_2''}{a_{22}'}$$

- 3rd ステップ以降
  - 省略(自明)

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}' & a_{23}' \\ 0 & 0 & a_{33}'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2' \\ b_3'' \end{pmatrix}$$

$$a_{22}' x_2 + a_{23}' x_3 = b_2'$$
$$a_{33}'' x_3 = b_3''$$

↓

$$x_3 = \frac{b_3''}{a_{33}''}$$

$$x_2 = \frac{b_2' - a_{23}' \dfrac{b_3''}{a_3''}}{a_{22}}$$

演習

- Gauss法により、次の連立方程式を数値計算により解け

$$
\begin{aligned}
2x - 1y - 1z &= +1 \\
3x - 2y + 2z &= -3 \\
1x - 2y + 1z &= -4
\end{aligned}
$$

演習の答え

$$x = 1$$

$$y = 2$$

$$z = -1$$

Gauss–Jordan法

- **Gauss法**
  - 行列 A の左下非対角成分を0にする

- **Gauss–Jordan法**
  - 行列 A の左下非対角成分を0にする（Gauss法に同じ）
  - 行列 A の右上非対角成分も0にする
  - 行列 A の対角成分を1にする

連立方程式の解 x が自動的に得られる

具体例（3行3列の場合）

- 解くべき連立方程式

$$2x - 1y - 1z = +1 \tag{11.5}$$
$$3x - 2y + 2z = -3 \tag{11.6}$$
$$1x - 2y + 1z = -4 \tag{11.7}$$

1. まず、式 (11.5) を定数倍して x の係数 (a_{11} に相当) を 1 にする。この式 (11.21) を用いて、式 (11.6)、(11.7) の x の係数を 0 にする。

$$1x - \frac{1}{2}y - \frac{1}{2}z = +\frac{1}{2} \quad \ldots (11.5) \times \frac{1}{2} \tag{11.21}$$
$$0x - \frac{1}{2}y + \frac{7}{2}z = -\frac{9}{2} \quad \ldots (11.6) - (11.21) \times 3 \tag{11.22}$$
$$0x - \frac{3}{2}y + \frac{3}{2}z = -\frac{9}{2} \quad \ldots (11.7) - (11.21) \times 1 \tag{11.23}$$

具体例（3行3列の場合）—続き—

2. 次に、式 (11.22) を定数倍して y の係数 (a_{22} に相当) を 1 にする。この式 (11.25) を用いて、式 (11.21)、(11.23) の y の係数を 0 にする。

$$1x + 0y - 4z = +5 \quad \ldots(11.21) - (11.25) \times \left(-\frac{1}{2}\right) \tag{11.24}$$

$$0x + 1y - 7z = +9 \quad \ldots(11.22) \times (-2) \tag{11.25}$$

$$0x + 0y - 9z = +9 \quad \ldots(11.23) - (11.25) \times \left(-\frac{3}{2}\right) \tag{11.26}$$

3. 最後に、式 (11.26) を定数倍して z の係数 (a_{33} に相当) を 1 にする。この式 (11.29) を用いて、式 (11.24)、(11.25) の z の係数を 0 にする。

$$1x + 0y + 0z = +1 \quad \ldots(11.24) + (11.29) \times 4 \tag{11.27}$$

$$0x + 1y + 0z = +2 \quad \ldots(11.25) + (11.29) \times 7 \tag{11.28}$$

$$0x + 0y + 1z = -1 \quad \ldots(11.26) \times \left(-\frac{1}{9}\right) \tag{11.29}$$

結果から分かるように、この方法では求める解 x が自動的に得られている。

演習2

- Gauss-Jordanの消去法により、連立方程式を解くサブルーチンを
  /home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/jordan.f
  に置く。
  このサブルーチンを用いて、連立方程式

$$2x + 4y + 6z = 6$$

$$3x + 8y + 7z = 15$$

$$5x + 7y + 21z = 24$$

を数値計算により解け。

プログラム(jordan)の説明(入出力のみ)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/jordan.f)

```
      subroutine jordan(n,f,b)
      implicit none
c*****************************************
c Gauss-Jordan の消去法により n 元連立方程式
c    Ax = b
c の解を求める。
c 入力
c    n: 次元
c    f: 係数行列 A の要素 (n x n)
c    b: ベクトル b の要素 (n)
c 出力
c    b: 解 x
c*****************************************
c input/output:
      integer n
      real     f(n,n),b(n)
```

このプログラムの機能

結果(解)は
b に上書きされる
(*b* の内容は破壊)

演習2の答え

$$x = -33$$

$$y = 9$$

$$z = 6$$

Gauss-Jordan法により逆行列を求める

- **Gauss-Jordan法**
  - 行列 A の左下非対角成分を0にする（Gauss法に同じ）
  - 行列 A の右上非対角成分も0にする
  - 行列 A の対角成分を1にする

Gauss-Jordan法は A を E (単位行列) に変換している
(A に A^{-1} をかけて E にしている)

同じ操作をEに対して行うと…

E に A^{-1} をかけるので A^{-1} に変換される

演習3

- Gauss-Jordanの消去法により、逆行列を求めるサブルーチンを
  /home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/matinv_jordan.f
  に置く。
  このサブルーチンを用いて、次の５行５列の行列

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}$$

  の逆行列を数値計算により求めよ。
- 上記で求めた逆行列が正しいことを、筆算と数値計算により確認せよ

プログラム(matinv_jordan)の説明(入出力のみ)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/matinv_jordan.f)

```
      subroutine matinv_jordan(n,a)
      implicit none
c***************************************
c Gauss-Jordan の消去法により n 次正方行列 A の
c 逆行列 A^-1 を求める。
c 入力
c    n: 次元
c    a: 行列 A の要素 (n x n)
c 出力
c    a: 逆行列 A^-1 の要素
c***************************************
c input/output:
      integer n
      real*8  a(n,n)
```

このプログラムの機能

結果(解)は
a に上書きされる
(*a* の内容は破壊)

行列要素は倍精度
(real*8)である必要
がある

プログラム例

```
c const
      integer N          ! 行列の次元
      parameter(N=5)
c local variable
      real*8  a(N,N)     ! 行列要素（倍精度）
c for loop
      integer i,j
c begin
      a(1,1)=  1.
      a(1,2)=  1.
```

途中略

```
      call matinv_jordan(N,a)
      do i=1,5
         write(*,'(5f7.2)') (a(i,j),j=1,5)
      end do
```

以下略

行に関するループ
1行目から5行目

列に関するループ
1列目から5列目の要素が
同一行に出力される

計算(出力)例

```
% frt -o matinv_jordan_test matinv_jordan_test.f matinv_jordan.f
matinv_jordan_test.f:
matinv_jordan.f:
Linking:
% ./matinv_jordan_test
   2.00  -1.00   0.00   0.00   0.00
  -1.00   2.00  -1.00   0.00   0.00
   0.00  -1.00   2.00  -1.00   0.00
   0.00   0.00  -1.00   2.00  -1.00
   0.00   0.00   0.00  -1.00   1.00
% 
```

演習の答え

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$