計算数学1　第1回課題解説

2008.5.26
作成者　田村博志

1(1)

$$\begin{cases} 2x_1 & -x_2 & -5x_3 & & = 16 \\ x_1 & & -x_3 & +x_4 & = 10 \\ x_1 & -x_2 & -x_3 & -2x_4 & = 4 \\ & x_2 & -x_3 & +2x_4 & = 4 \end{cases}$$

につき部分軸選択つきGaussの消去法で解を導出する.

(第1段)

1列目において絶対値最大は1行目にあるので行の交換は行わない. 2行目以下の1列目を消去するために1行目の $-1/2$ 倍を2行目, 3行目に加える.

$$\begin{cases} 2x_1 & -x_2 & -5x_3 & & = 16 \\ & \frac{1}{2}x_2 & +\frac{3}{2}x_3 & +x_4 & = 2 \\ & -\frac{1}{2}x_2 & +\frac{3}{2}x_3 & -2x_4 & = -4 \\ & x_2 & -x_3 & +2x_4 & = 4 \end{cases}$$

(第2段)

2列目2行以下において絶対値最大は4行目にあるので2行目と4行目を交換する.

$$\begin{cases} 2x_1 & -x_2 & -5x_3 & & = 16 \\ & x_2 & -x_3 & +2x_4 & = 4 \\ & -\frac{1}{2}x_2 & +\frac{3}{2}x_3 & -2x_4 & = -4 \\ & \frac{1}{2}x_2 & +\frac{3}{2}x_3 & +x_4 & = 2 \end{cases}$$

3行目以下の2列目を消去するために2行目の $1/2$ 倍を3行目に, $-1/2$ 倍を4行目にそれぞれ加える.

$$\begin{cases} 2x_1 & -x_2 & -5x_3 & & = 16 \\ & x_2 & -x_3 & +2x_4 & = 4 \\ & & x_3 & -x_4 & = -2 \\ & & 2x_3 & & = 0 \end{cases}$$

(第3段)

3列目3行以下において絶対値最大は4行目にあるので3行目と4行目を交換する.

$$\begin{cases} 2x_1 & -x_2 & -5x_3 & & = 16 \\ & x_2 & -x_3 & +2x_4 & = 4 \\ & & 2x_3 & & = 0 \\ & & x_3 & -x_4 & = -2 \end{cases}$$

4 行目の 3 列目を消去するために 3 行目の $-1/2$ 倍を 4 行目に加える.

$$\begin{cases} 2x_1 & -x_2 & -5x_3 & & = 16 \\ & x_2 & -x_3 & +2x_4 & = 4 \\ & & 2x_3 & & = 0 \\ & & & -x_4 & = -2 \end{cases}$$

これで前進消去が完了である. 対角成分に 0 がないので, この行列は正則である. 後退代入で解を求める.

$$\begin{aligned} x_4 &= -(-2) = 2 \\ x_3 &= \frac{0}{2} = 0 \\ x_2 &= 4 + x_3 - 2x_4 = 0 \\ x_1 &= \frac{1}{2}(16 + x_2 + 5x_3) = 8 \end{aligned}$$

よって解は $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 8 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$

問題は解きっぱなしにせず, 元の方程式に解を代入して検算するのが望ましい. コンピュータで計算をした場合は誤差が入るので $||A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}||$ の評価が重要である.

(2) 前進消去過程を行列で表示すると

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \ G_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ G_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$P_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},\ G_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

となる．よって

$$\begin{aligned} G &= G_3P_3G_2P_2G_1P_1 \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & 1 & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(3)

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -5 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & -1 & 2 \end{pmatrix},\ \ \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 16 \\ 10 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

とおけば方程式は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ となる．GA と $G\boldsymbol{b}$ を計算すると

$$GA = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -5 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},\ G\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 16 \\ 4 \\ 0 \\ -2 \end{pmatrix}$$

これは (1) の前進消去後の結果と一致する．

(4)

方程式 $A\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{e}_k$ の両辺左から G をかけると

$$(GA)\boldsymbol{x}_k = G\boldsymbol{e}_k$$

となる．$G\boldsymbol{e}_k$ は G の k 列ベクトルであることを利用して後退代入だけを行えばよい．

$$(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 1 & 1 & \frac{1}{2} \\ -\frac{3}{4} & -\frac{1}{2} & 2 & \frac{9}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -1 & -\frac{3}{4} \end{pmatrix}$$ で，これは A の逆行列となっている．

2　直交性 $(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) = 0$ と共役直交性 $(A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j) = 0 (i \neq j)$ の証明

$$\text{直交性：}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) = 0 \ (i \neq j) \tag{1}$$
$$\text{共役直交性：}(A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j) = 0 \ (i \neq j) \tag{2}$$

となることを示す.

$(A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j) = (\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_j)$ より $i < j$ としても一般性を失わない. $0 \leq i < j \leq k$ で成立することを k について帰納法で示す.

・$k = 1$ のとき (つまり $i = 0, j = 1$)

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1) &= (\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0 - \alpha_0 A\boldsymbol{p}_0) \\
&= (\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{r}_0) - \frac{(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_0)}(\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0) \\
&= 0 \\
(A\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1) &= 0 \quad \boldsymbol{p}_1\text{の定義より}
\end{aligned}$$

・$0 \leq i < j \leq k$ につき (1), (2) が成り立つとして

$$(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) = 0 \qquad (0 \leq i < j \leq k+1) \tag{3}$$
$$(A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j) = 0 \qquad (0 \leq i < j \leq k+1) \tag{4}$$

が成り立つことを示す.　$0 \leq i < j \leq k$ のときは帰納法の仮定から成立するので $j = k+1$ のときを示せばよい. まず直交性を示す.

(直交性)

$i < k$ のとき

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{k+1}) &= (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k) \\
&= (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_k) - \alpha_k(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_k) \\
&= (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_k) - \alpha_k(\boldsymbol{p}_i - \beta_{i-1}\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_k) \\
&= (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_k) - \alpha_k(\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_k) \qquad \text{仮定 (2) より} \\
&= (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_k) - \frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}(\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_k) \\
&= 0 \qquad \text{仮定 (1), (2) より}
\end{aligned}$$

$i = k$ のとき

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_{k+1}) &= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) - \frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k) \\
&= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) - (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k) \\
&= 0 \quad \text{付録の (14) より}
\end{aligned}$$

以上より (3) が示されたので直交性が示せた. 次に共役直交性 (4) を示す.
(共役直交性)
$i < k$ のとき

$$
\begin{aligned}
(A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_{k+1}) &= (A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k) && \text{(12) より} \\
&= (A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{r}_{k+1}) && \text{帰納法の仮定により} \\
&= \frac{1}{\alpha_i}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_{i+1}, \boldsymbol{r}_{k+1}) && \text{(11) より} \\
&= 0 && \text{前半の } (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) = 0 (i < j) \text{ により}
\end{aligned}
$$

$i = k$ のとき

$$(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_{k+1}) = 0 \qquad \boldsymbol{p}_{k+1} \text{ の定義より}$$

以上より (4) が示されたので共役直交性が示せた.

付録　CG 法のアルゴリズム

正値対称行列 A に対する $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ に対する CG 法のアルゴリズムを導出する.

$$f(\boldsymbol{x}) := \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b}) \tag{5}$$

とおくと f を最小にする$\boldsymbol{x}$が $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$の解であるという事実に基づいて適当な$\boldsymbol{x}_0$から出発して近似解$\boldsymbol{x}_k$を構成する.

$$\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k \tag{6}$$
$$\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0 \tag{7}$$
$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k \tag{8}$$

$\boldsymbol{p}_k \neq \boldsymbol{o}$のとき$\alpha_k$は $f(\boldsymbol{x}_{k+1})$ を最小にするものを選ぶ ($\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{o}$ なら $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{o}$で終了). (2), (4) ならびに A の対称性を用いて

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}_{k+1}) &= \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}_{k+1}, \boldsymbol{x}_{k+1}) - (\boldsymbol{x}_{k+1}, \boldsymbol{b}) \\
&= \frac{1}{2}(A(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k), \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k) - (\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{b}) \\
&= f(\boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}_k, \alpha_k \boldsymbol{p}_k) + \frac{1}{2}(\alpha_k A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}(\alpha_k A\boldsymbol{p}_k, \alpha_k \boldsymbol{p}_k) \\
&\quad - (\alpha_k \boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{r}_k) \\
&= f(\boldsymbol{x}_k) - \frac{1}{2}\alpha_k (A\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{p}_k) + \frac{1}{2}\alpha_k (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}\alpha_k^2 (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) - \alpha_k (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k) \\
&= f(\boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}\alpha_k^2 (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) - \alpha_k (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)
\end{aligned}
$$

A は正定値であり $(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) > 0$ を係数とするα_k の 2 次式なのでこれを最小にするα_kは

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} \tag{9}$$

で与えられる.

$\boldsymbol{x}_{k+1}$は (8), $\boldsymbol{r}_{k+1}$は (6) によって定義される.

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k+1} \tag{10}$$

しかし (10) は $k+1$ 番目の量を使わずに次のようにも書ける.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_{k+1} &= \boldsymbol{b} - A(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k) \\ &= \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k \end{aligned} \tag{11}$$

次に$\boldsymbol{p}_{k+1}$ を決める.

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k \tag{12}$$

の形でβ_kを

$$(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_{k+1}) = 0 \tag{13}$$

なるように選ぶ.

$$\begin{aligned} (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_{k+1}) &= (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k) \\ &= (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_{k+1}) + \beta_k (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) \\ &= 0 \end{aligned}$$

これより

$$\beta_k = -\frac{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}$$

またα_kの分子は次のようにも書ける.

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k) &= (\boldsymbol{r}_k + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{r}_k) && \text{(12) より} \\ &= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) + \beta_{k-1}(\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{r}_{k-1} - \alpha_{k-1}A\boldsymbol{p}_{k-1}) && \text{(11) より} \\ &= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) + \beta_{k-1}\left((\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{r}_{k-1}) - \frac{(\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{r}_{k-1})}{(A\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{p}_{k-1})}(A\boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{p}_{k-1}) \right) && \text{(9) より} \\ &= (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) && (14) \end{aligned}$$

実はこの式から$\boldsymbol{r}_k \neq \boldsymbol{o} \Longrightarrow \boldsymbol{p}_k \neq \boldsymbol{o}$ も出る,

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}$$

以上からアルゴリズムは適当な $\boldsymbol{x}_0$ から出発して

$$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0 \quad \boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0 (\text{初期設定}) \quad k = 0 \tag{15}$$

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} \tag{16}$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k \tag{17}$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k+1} \tag{18}$$

$||\boldsymbol{r}_{k+1}||$ の評価. ある程度小さければ終了

$$\beta_k = -\frac{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)} \tag{19}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k \ (\boldsymbol{r}_{k+1} \neq \boldsymbol{o} \text{なので} \boldsymbol{p}_{k+1} \neq \boldsymbol{o}) \tag{20}$$

k に 1 を加えて (16) へ行く

となる.