計算数学1　第1回課題解説

2007.6.11
作成者　田村博志

1 (1)

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 - 2x_4 &= -28 \\ x_1 \qquad\quad - x_3 + x_4 &= -1 \\ 2x_1 - 2x_2 - 4x_3 - 2x_4 &= -52 \\ \qquad x_2 - x_3 + 2x_4 &= 7 \end{cases} \tag{1}$$

部分軸選択法では対角要素の絶対値を最大とするように方程式（行）を選択する．これにより消去の乗数 $|\alpha_{ik}| \leq 1$ として計算時における誤差の伝播を防ぐ．以下，上の方程式につき実際に部分軸選択法付き Gauss の消去法の操作を行う．

第1段：
1列目のうち x_1 の係数の絶対値が最大なのは3行目の2なので1行目と3行目を交換する．

$$\begin{cases} 2x_1 - 2x_2 - 4x_3 - 2x_4 &= -52 \\ x_1 \qquad\quad - x_3 + x_4 &= -1 \\ x_1 + 2x_2 - x_3 - 2x_4 &= -28 \\ \qquad x_2 - x_3 + 2x_4 &= 7 \end{cases} \tag{2}$$

2行目以下の x_1を消去すべく，方程式(2)の2行目に1行目の $-\frac{1}{2}$倍, 3行目に1行目の $-\frac{1}{2}$倍を加える.$\alpha_{21} = -\frac{1}{2}, \alpha_{21} = -\frac{1}{2}, \alpha_{41} = 0.$

$$\begin{cases} 2x_1 - 2x_2 - 4x_3 - 2x_4 &= -52 \\ \qquad x_2 + x_3 + 2x_4 &= 25 \\ \qquad -x_2 + x_3 - x_4 &= -2 \\ \qquad x_2 - x_3 + 2x_4 &= 7 \end{cases} \tag{3}$$

第2段：
2列目のうち2行目以下で x_2の係数の絶対値は全て同じなのでどの行を2行目に持ってくることも可能だがその場合は数字の若い行と決めているので2行目そのものを採択する．よって交換は行わない．

$$\begin{cases} 2x_1 - 2x_2 - 4x_3 - 2x_4 &= -52 \\ \qquad x_2 + x_3 + 2x_4 &= 25 \\ \qquad -x_2 + x_3 - x_4 &= -2 \\ \qquad x_2 - x_3 + 2x_4 &= 7 \end{cases} \tag{4}$$

3 行目以下の x_2を消去すべく，方程式 (4) の 3 行目に 2 行目, 4 行目に 2 行目の -1 倍を加える.$\alpha_{32} = -1, \alpha_{42} = -1.$

$$\left\{\begin{array}{rcl} 2x_1 - 2x_2 - 4x_3 - 2x_4 &=& -52 \\ x_2 + \ x_3 + 2x_4 &=& 25 \\ 2x_3 + \ x_4 &=& 23 \\ -2x_3 \qquad &=& -18 \end{array}\right. \tag{5}$$

第 3 段：
3 列目のうち 3 行目以下で x_3の係数の絶対値は全て同じなので第 3 段同様やはり交換は行わない.

$$\left\{\begin{array}{rcl} 2x_1 - 2x_2 - 4x_3 - 2x_4 &=& -52 \\ x_2 + \ x_3 + 2x_4 &=& 25 \\ 2x_3 + \ x_4 &=& 23 \\ -2x_3 \qquad &=& -18 \end{array}\right. \tag{6}$$

4 行目の x_3を消去すべく，方程式 (6) の 4 行目に 3 行目を加える.$\alpha_{43} = 1$

$$\left\{\begin{array}{rcl} 2x_1 - 2x_2 - 4x_3 - 2x_4 &=& -52 \\ x_2 + \ x_3 + 2x_4 &=& 25 \\ 2x_3 + \ x_4 &=& 23 \\ x_4 &=& 5 \end{array}\right. \tag{7}$$

係数行列が上三角されたので前進消去過程が終了．方程式 (7) の対角成分が全て 0 でないので方程式 (7)，それと同値な方程式 (1) は可解である．以下後退代入で下の行から順に解を求めていく.

$x_4 = 5$

$$x_3 = \frac{23 - x_4}{2} = \frac{23-5}{2} = 9$$

$$x_2 = 25 - x_3 - 2x_4 = 25 - 9 - 2 \cdot 5 = 6$$

$$x_1 = \frac{-52 + 2x_2 + 4x_3 + 2x_4}{2} = \frac{-52 + 2 \cdot 6 + 4 \cdot 9 + 2 \cdot 5}{2} = 3$$

よって，$x_1 = 3\ x_2 = 6\ x_3 = 9\ x_4 = 5$

(2)

上記の操作を行列で表現する.第 k 段における行の交換，および消去を表す行列を P_k, G_kとすると

$$P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad P_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$G_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad G_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad G_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

従って，

$$G := G_3 P_3 G_2 P_2 G_1 P_1$$

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

(3)

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & -2 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \\ 2 & -2 & -4 & -2 \\ 0 & 1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{b} := \begin{pmatrix} -28 \\ -1 \\ -52 \\ 7 \end{pmatrix}$$

により $A, \boldsymbol{b}$を定義すると方程式 (1) は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の形で書ける.問題 (2) で求めた G を用いて $GA, G\boldsymbol{b}$を計算すると

$$GA = \begin{pmatrix} 2 & -2 & -4 & -2 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad G\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} -52 \\ 25 \\ 23 \\ 5 \end{pmatrix}$$

問題 (1) で上三角化した結果と一致する.

(4)

まず左辺について考える.第 k 段の操作中に値の更新が何回行われるかを概算する．行の交換は消去回数に比べてオーダー 1 桁分小さいので, n が十分大きいときには無視してもよい. $k+1$ 行目以降の x_k を消去するとき $x_1, \cdots, x_{k-1}$ はすでに消去されているはずなので値が変わるのは $x_{k+1}, \cdots, x_n$ の $n-k$ 個である．行数は $k+1$ 行から n 行までの $n-k$ 行なので第 k 段の消去で更新される値の個数は最大 $(n-k)^2$ 個.操作は第 1 段から第 $n-1$ 段まで続くので総数は

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2 = \frac{1}{6}(n-1)n(2n-1) \fallingdotseq \frac{1}{3}n^3$$

次に右辺について考える.第 k 段の消去で $n-k$ 回, 総数は

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k) = \frac{1}{2}(n-1)n \fallingdotseq \frac{1}{2}n^2$$

よって概算で，左辺で $\frac{1}{3}n^3$ 回，右辺で $\frac{1}{2}n^2$ 回更新がなされる.

2

$n \times n$ 行列 A によって定義される $\mathbf{R}^n$ 上の線形作用素をふたたび A と書く. $KerA, ImA$ で A の核，像を表す．次の 2 つが容易に示される.

(a) A は単射 $\Longleftrightarrow$ A は全射

(b) A は正値 $\Longrightarrow$ A は単射

実際 (a) は準同型定理 $\mathbf{R}^n/KerA \cong ImA$ またはそれから自然に従う次元の関係式 $dim\mathbf{R}^n - dim(KerA) = dim(ImA) = rankA$ から導かれる．(b) は $\boldsymbol{x} \in KerA$ とすると $(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = 0$，A の正値性から $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{o}$．よって $KerA = \{\boldsymbol{o}\}$ より A は単射.

従って A が正値なら (b) により A は単射で (a) によりさらに正則でもある．さらに I で n 次単位行列を表すと

$AA^{-1} = A^{-1}A = I$

各辺に転置を施すと，もちろん $I^T = I$ なので

$(A^{-1})^T A^T = A^T (A^{-1})^T = I$

上式から A^T もまた正則で $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$.

これより本題に移る．$f(\boldsymbol{x}) := \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x})$ とおく．f の最小値を与える $\boldsymbol{x}$ の導出につき 2 通りの方法を紹介する.

方法 1) 平方完成

最も簡単な $n = 1$ の場合を考えると $A, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}$ などはただ 1 つの成分 a, b, x とみなせ

る．ただし後々を考慮して行列とその 1 つの成分とを厳密に区別する．このように考えれば高校生でもよく知っている平方完成によって

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) &= \frac{1}{2}ax^2 - bx \\
&= \frac{1}{2}a(x - a^{-1}b)^2 - \frac{1}{2}a^{-1}b^2 \\
&= \frac{1}{2}(A(\boldsymbol{x} - A^{-1}\boldsymbol{b}), \boldsymbol{x} - A^{-1}\boldsymbol{b}) - \frac{1}{2}(A^{-1}\boldsymbol{b}, \boldsymbol{b}).
\end{aligned}
$$

最後の形式は $n \geq 2$ でも定義される量で実は A に対称性があれば最後の形が $f(\boldsymbol{x})$ に等しいことがわかる．実際，最後の式を $g(\boldsymbol{x})$ とおくと一般の n につき

$$
\begin{aligned}
g(\boldsymbol{x}) &= \frac{1}{2}((A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (A\boldsymbol{x}, A^{-1}\boldsymbol{b}) - (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}) + (\boldsymbol{b}, A^{-1}\boldsymbol{b})) - \frac{1}{2}(A^{-1}\boldsymbol{b}, \boldsymbol{b}) \\
&= \frac{1}{2}((A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b}) - (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x})) \\
&= f(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

g の形で f をながめると第 2 項の内積は $\boldsymbol{x}$ に依らない定数なので，第 1 項が最小のとき g，すなわち f が最小となる．A の正値性により任意の $\boldsymbol{x}$ につき第 1 項 ≥ 0 で等号成立は $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$，つまり $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ のときに限る．よって f を最小にする $\boldsymbol{x}$ は方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解である．

方法 2) 偏導関数 (Fréchet 微分) での考察
A の (i, j) 成分を a_{ij}，$\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}$ の第 i 成分を b_i, x_i として $f(\boldsymbol{x})$ を素朴に n 変数関数とみる．実際に成分で f を書き下すと

$$
f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{i=n}\sum_{j=1}^{j=n} a_{ij}x_i x_j - \sum_{i=1}^{i=n} b_i x_i
$$

f は x_i たちの多項式なのでもちろん $\mathbf{C}^\infty$ 級で，従ってもし f に最小値が存在すればその点で $\nabla f = grad f = \boldsymbol{o}$ となっているはずである．よって最小値を実現する点を $\nabla f = \boldsymbol{o}$ の解の中から探してみる．まず ∇f を計算する．

$$
\frac{\partial f}{\partial x_k}(\boldsymbol{x}) = a_{kk}x_k + \frac{1}{2}\sum_{i \neq k} a_{ik}x_i + \frac{1}{2}\sum_{j \neq k} a_{kj}x_j - b_k
$$

第 2 項の和をとる変数 i を j に置き換える．A の対称性 $a_{ij} = a_{ji}$ も考慮すると第 2 項および第 3 項は同じ値であることがわかる．最初の $a_{kk}x_k$ も合わせて

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial x_k}(\boldsymbol{x}) &= \sum_{j=1}^{j=n} a_{kj}x_j - b_k \\
&= (A\boldsymbol{x}\text{の第 } k \text{ 成分}) - b_k
\end{aligned}
$$

よって
$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$$
$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{o}$ とおくと A の正則性により $\boldsymbol{x}_o := A^{-1}\boldsymbol{b}$ なる $\boldsymbol{x}_o$ が f の最小値を与える点の候補として得られる．この段階ではあくまで候補である．$f(\boldsymbol{x})$ が $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_o$ のときに最小なることは A の正値性からも議論できようが最小値の定義に基づき，
$$f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}_o) \qquad \forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$$
を示すのが直接的であろう．差をとって計算してみると $\boldsymbol{b} = A\boldsymbol{x}_o$ なので
$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) - f(\boldsymbol{x}_o) &= \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}) - \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}_o) + (A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}_o) \\ &= \frac{1}{2}((A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - 2(A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}) + (A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}_o)) \\ &= \frac{1}{2}((A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{x}_o, A\boldsymbol{x}) + (A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}_o)) \\ &= \frac{1}{2}(A(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_o), \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_o) \\ &= \frac{1}{2}(A\boldsymbol{h}, \boldsymbol{h}) \qquad \boldsymbol{h} := \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_o \end{aligned}$$
3 番目の等号で A の対称性 $(A\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}_o, A\boldsymbol{x})$ を用いた．最後の式は A の正値性から 0 以上で 0 になるのは $\boldsymbol{h} = \boldsymbol{o} \Longleftrightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_o$ のときに限る．よって f を最小にする $\boldsymbol{x}$ は方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解である．