数値解析（松尾）　配付資料　　2019 年 10 月 7 日

■ Gauss の消去法

枢軸選択付き Gauss の消去法のアルゴリズム

【前進消去】

for $k := 1$ to $n-1$ {
　$|A[i,k]|$ $(k \le i \le n)$ を最大にする i を探す (※)
　$b[i]$ と $b[k]$ を交換 (※)
　for $j := k$ to n { $A[i,j]$ と $A[k,j]$ を交換 } (※)
　$w := 1/A[k,k]$
　for $i := k+1$ to n {
　　$M[i,k] := A[i,k] \times w$
　　for $j := k+1$ to n {
　　　$A[i,j] = A[i,j] - M[i,k] \times A[k,j]$
　　}
　　$b[i] := b[i] - M[i,k] \times b[k]$
　}
}

【後退代入】

for $i := n$ to 1 {
　$x[i] := (b[i] - \sum_{j=i+1}^{n} A[i,j] \times x[j])/A[i,i]$
}

注意：実際には，$M[i,k]$ は $A[i,k]$ に上書きするか（→ LU 分解），あるいは単に変数 m として持ち保存しない．また後退代入時はわざわざ $\boldsymbol{x}$ をとらず $\boldsymbol{b}$ に書き込むのが通例.（つまりこの手続きを呼び出すと，行列 A，ベクトル $\boldsymbol{b}$ は破壊され，代わりに $\boldsymbol{b}$ に解が入る.）枢軸選択なしの場合は（※）部分を削除.

LU 分解のアルゴリズム

for $i := 1$ to n { $p[i] := i$ }
for $k := 1$ to $n-1$ {
　$|A[i,k]|$ $(k \le i \le n)$ を最大にする i を探す
　$p[i]$ と $p[k]$ を交換
　for $j := 1$ to n { $A[i,j]$ と $A[k,j]$ を交換 }
　$w := 1/A[k,k]$
　for $i := k+1$ to n {
　　$A[i,k] := A[i,k] \times w$
　　for $j := k+1$ to n {
　　　$A[i,j] = A[i,j] - A[i,k] \times A[k,j]$
　　}
　}
}

注意：行列 A と空のベクトル $\boldsymbol{p}$ を渡すと，A に LU 分解形が上書きされ，$\boldsymbol{p}$ に行交換情報が入る.

■ベクトルと行列のノルム

線形空間 X の要素 x に実数 $\|x\|$ が対応し，次の 4 つの条件を満たすとき，$\|x\|$ を「ノルム」と呼ぶ：(i) $\|x\| \geq 0$，(ii) $\|ax\| = |a|\|x\|$ $(a \in \mathbb{C})$，(iii) $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$，(iv) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ $(y \in X)$.

以下，$p \in \{1, 2, \ldots, \infty\}$ とする．

ベクトルのノルム：$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して，$\|\boldsymbol{x}\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_N|^p)^{1/p}$.
行列のノルム：$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対して，$\|A\|_p = \sup_{\boldsymbol{x} \neq 0} \dfrac{\|A\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p}$.

このように定義された行列のノルムは，特に $p = 1, 2, \infty$ の場合に，以下の等式を満たす．

定理 1 $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$（最大列和），$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$（最大行和），
$\|A\|_2 = A$ の最大特異値 $= \sqrt{\rho(A^T A)}$（$\rho(B)$ は行列 B のスペクトル半径）.

（証明）略．講義で紹介した参考書を参照． □

次の不等式はよく用いられる．

定理 2 $\|A\boldsymbol{x}\|_p \leq \|A\|_p \|\boldsymbol{x}\|_p$，$\|AB\|_p \leq \|A\|_p \|B\|_p$（「劣乗法性」; $p = 1, 2, \ldots, \infty$）.

（証明）定義より，任意の $\boldsymbol{x}$ に対して

$$\|A\|_p = \sup_{\boldsymbol{x} \neq 0} \frac{\|A\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p} \geq \frac{\|A\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p}.$$

1 番目の不等式はこれから明らか．2 番目の不等式は，

$$\|AB\|_p = \sup_{\boldsymbol{x} \neq 0} \frac{\|AB\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p} \leq \|A\|_p \sup_{\boldsymbol{x} \neq 0} \frac{\|B\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p}$$

から得られる．ただし，ここで 1 番目の不等式を使った． □

注意：行列のノルムは，上の他に Frobenius ノルム

$$\|A\|_F := \sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} |a_{ij}|^2}$$

もよく使われる．このノルムも劣乗法性を満たす．

【演習】（自分の興味に従って自習し，理解・実装力を高めることを奨励する）

1. 行列のノルムについて定理 1 を示せ．また Frobenius ノルムも劣乗法的であることを示せ．
2. 複数のノルム間には様々な性質が成立する．例えば $\|A\|_\infty / n \leq \|A\|_1 \leq n\|A\|_\infty$．これを示せ.（cf. 有限次元ノルムの同値性）.
3. Gauss の消去法を n 次の連立一次方程式に適用した際の計算量（四則演算それぞれ）を精密に見積もってみよ.（この種の計算は一度やっておくとその後の参考となる.）
4. MATLAB，Python（+numpy）等，自分に適した環境で，種々行列演算を行ってみよ（行列の定義，演算，連立一次方程式の求解等）.