

# 数値計算法概論:No.11

## 1 行列の計算

様々ある行列の計算の中から、ここでは逆行列を求める事を行う。  
逆行列を求めると、

- 線形の連立方程式が解ける。

などの利点がある。(  $E$  は単位行列を表す)

### 1.1 逆行列の求め方

逆行列を求める方法としては、

- 余因子行列を使う方法
- Gauss-Jordan の掃き出し法を使う方法 (数学の本の p47)
- 三角行列 ( $LU$  行列) にわけて計算する方法

などがある。実際のプログラムやアルゴリズムが簡単であるので、ここでは Gauss-Jordan の掃き出し法を使って、逆行列を求める。

### 1.2 Gauss-Jordan の掃き出し法

$A$  の逆行列を求めたい。まずは、 $A$  と  $E$  を並べて  $(A : E)$  とします。

基本操作 (線形代数の本 [1] p4) を行って、 $A$  が単位行列になるように変形します。その変形により  $E$  が、 $B$  になったとすると、 $B = A^{-1}$  となります。

なぜならば基本操作を繰り返す事は、基本操作の行列 (数学の本 p87) の積を左からかける事である。 $A$  を  $E$  にした時に使った基本操作の行列の積を  $B$  として、

$$\begin{aligned} B(A : E) &= (BA : B) \\ &= (E : B) \end{aligned}$$

となるので、 $B = A^{-1}$  が得られる。

### 1.2.1 行列の基本変形

行列の(左)基本変形は次のようなものである。

1. 2つの行の入れ換え。
2. ある行に0でない数を掛ける。
3. ある行に別の行の定数倍を加える。

このうち、2、3を使うと、単位行列への変換(+逆行列の導出)が一応出来る。基本変形1.は後出のPivotingで使う。

### 1.2.2 プログラムの指針(AをEにする)

掃き出し法の指針としては、1列目から右に向かって順に掃き出していく(1~n列まで]  
具体的には

#### ステップ1.

まず、 $wa := A_{kk}$  という中間変数を入れて、第k行を  $wa$  で割ったものに置き換える。

$$A_{kj} := A_{kj}/wa \quad (j = 1, \dots, n) \quad (1)$$

#### ステップ2.

第k行以外の  $i = 1 \sim n$  行( $i = 1, \dots, k-1, k+1, \dots, n$ ) について以下の操作を行なう。  
今度は  $wb := A_{ik}$  という中間変数を入れて、第i行から第k行を  $wb$  倍したものを引く。

$$A_{ij} := A_{ij} - A_{kj} * wb \quad (j = 1, \dots, n) \quad (2)$$

ステップ1、2により、k列の非対角成分0、対角成分1になる。

$$\begin{pmatrix} ? & 0 & ? \\ ? & : & ? \\ ? & 0 & ? \\ ? & 1 & ? \\ ? & 0 & ? \\ ? & : & ? \\ ? & 0 & ? \end{pmatrix}$$

#### ステップ3.

ステップ1、2を  $k = 1$  から  $k = n$  まで順次実行する。

#### ○確認

この操作で、行列Aを単位行列に変形できることを確かめよ。

### 1.2.3 行列出力の方法(do形反復)

行列を出力する時、do loop文で各成分を順に書き出しても良いが、

```

do i=1,L
  write (*,*) (A(i,j), j=1,N)
end do

```

とした方がスマート。行列の入力にも同じ方法が使える。

### 1.2.4 $(E : B)$ を作るプログラム

$A$  から  $E$  を作る時のプログラム上の操作を単位行列にもほどこしてやれば、 $E$  を  $B$  にすることができる。操作としては、始めに  $(A : E)$  からなる  $n$  行  $2n$  列の行列を作り、これに対し掃き出し法の操作 (但し、列の操作を  $j = 1, \dots, n$  から  $j = 1, \dots, 2n$  へ拡張) を行なう。

実際に

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

などの逆行列を求めてみましょう。

## 1.3 行列の積を計算するプログラム

これで  $A$  の逆行列がもとまったのであるが、正しい答えになってるかを確かめておいた方が安心である。逆行列になってるかどうかをチェックすればいいのだから、 $A$  と、 $A^{-1}$  の行列の積を計算して実際に単位行列になるかを確かめればいい。

$L * N$  行列のものと、 $N * M$  行列のものの積を計算する。

$$C(L,M)=A(L,N)*B(N,M)$$

$C$  の各成分について書くと、

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^N A_{ik} B_{kj}$$

となる。各成分を  $(i = 1 \sim L)$  と、 $(j = 1 \sim M)$  について計算してやれば行列の積が求まる。

課題

先ほど求めた  $A^{-1}$  と  $A$  との積を計算して単位行列になっていることを確かめましょう。

## 1.4 Pivoting

では、次に

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 5 \\ 6 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

の逆行列を求めてみましょう。

失敗したのではないのでしょうか？なぜだ？( 答え： $A_{kk} = 0$  だから )

この行列の行列式は0ではないので逆行列は存在する。逆行列を求めようと思ったら、0で割り算をしないようにすればいい。その方法が pivoting である。

pivoting には、

- full pivoting
- partial pivoting

がある。簡単な partial pivoting を使う。

#### 1.4.1 Partial Pivoting の指針

掃き出し法のプログラムで  $k$  列目の処理する時に、 $k$  列の中から一番大きい成分を探してその行と  $k$  行とを入れ替えて計算する。

### 1.5 その他

#### 1.5.1 計算量について

- 余因子行列法と比較 ( $O(N^3)$  vs.  $O(N!)$ )
- $LU$  行列を求める方法よりは、1.5 倍多い

#### 1.5.2 メモリ節約型

(Fortran の本 [2] の p73) に Gauss-Jordan の掃き出し法が載っている。この方法だと、行列を1つだけ用意すればいいので、メモリの節約になる (但しプログラムはやや複雑になる)。

## 2 レポート No.4:行列演算

行列の積と、逆行列についてのプログラムと実行例をレポートにまとめる。

逆行列については、プログラムの作成そのものに加え、Gauss-Jordan の消去法 (掃きだし法) について解説すること。余裕があれば  $LU$  分解などについても調べてみよ。

提出期限: 8月1日

### 参考文献

- [1] 「基礎 線形代数」 押川元重・坂口紘治 (培風館)
- [2] 「Fortran90 入門」 新井親夫 (森北出版株式会社)