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 ($1 \sim n$ 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。

$$A_{kj} := A_{kj}/wa \qquad (j = 1, \cdots, n) \tag{1}$$

ステップ 2.

第 k 行以外の $i = 1 \sim n$ 行($i = 1, \cdots, k-1, k+1, \cdots, n$) 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。

$$A_{ij} := A_{ij} - A_{kj} * wb \qquad (j = 1, \cdots, n) \tag{2}$$

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 $j=1,\cdots,n$ から $j=1,\cdots,2n$ 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: 7 月 30 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)