2005年4月20日（水）

2005年度
数値解析講義　前期水曜３限

青柳　睦
aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター５階５０２

講義内容

{括弧} の項目はSkipまたは参考程度

1．超越方程式 (非線形方程式) の解法

1．1　2分法　→　演習

1．2　{補間法}

1．3　ニュートン法　→　演習

2．代数方程式の解法

2．1　グラーフェの方法　→　(演習)

2．2　{ベルヌーイの方法}

3．連立一次方程式の解法

3．1　行列計算　→　演習

3．2　ガウスの消去法　→　演習

3．3　3重対角行列の場合の解法

3．4　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学(社会学？)分野で活用されている計算科学の概論を紹介します (予定)．

3．5　特異値分解法

3．6　共役勾配法

3．7　反復法

4．固有値と固有ベクトルの近似計算

4．1　レバリエールの方法

4．2　3重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算

4．3　ランチョスの方法（3重対角行列への帰着）

4．4　ギブンスの方法（対称な3重対角行列への帰着）

4．5　ヤコビの方法（対角行列への帰着）

5．ラグランジュの未定乗数法

6．勾配法

6．1　最急降下法

6．2　最急降下加速法

6．3　ステップ幅の決め方

4章　「固有値･･」以降は，講義と演習の進捗状況によっては項目を絞った内容にする可能性があります･･．

成績評価，その他

- 出席点５割＋前期末試験５割
- 講義ノートは，毎回配りますが
  もし欠席したら各自でDLしてください
  server-500.cc.kyushu-u.ac.jp
  （講義ノートはその週の土曜日深夜までには公開予定）
- 次回から座席指定でお願いします
  ３０分後には座席表から出欠を取ります
- 研究室の電話は 092-642-3838
- メールは，aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp
  Subjectには，「数値解析」と記入
  してください

前回の復習

逐次近似

逐次法に共通する一般的な考え方

真の値を求めるのではなく、「なるべく真の値に近い値」を求める。

（精度の良い近似値を求める。）

「1つの近似値が見つかったら、それを使ってもっと精度の良い近似値を計算する公式を」作る。

まず、1つの近似値を見つけ、それにこの公式を適用し、その結果をまたこの公式に入れ、これを何度も繰り返す。

最終的に実用上十分な精度の解が得られる。

計算科学的な観点からは・・
「逐次法」は　問題サイズ(n) に対する演算量の正確な予測が得にくい，一方，「直接法」は演算量が明確に決まる場合が多い・・
e.g. $O(n^2)$, $O(\log n)$　etc．

（参考）　３次方程式の解法（直接法）

$$x^3 + bx^2 + cx + d = 0$$

$x = y - b/3$とおき，$y^3 + py + q = 0$と変形

ただし，$p = c - b^2/3, q = d - bc/3 + 2b^3/27$

$t^2 + qt - p^3/27 = 0$の解をt_1, t_2とし・・

$u = t_1^{1/3}, v = t_2^{1/3}$と書くとき，

解

$$x_1 = u + v - b/3$$

$$x_2 = uw + vw^2 - b/3$$

$x_3 = uw^2 + vw - b/3$, ただし$w = \exp(2\pi i/3)$

補間法

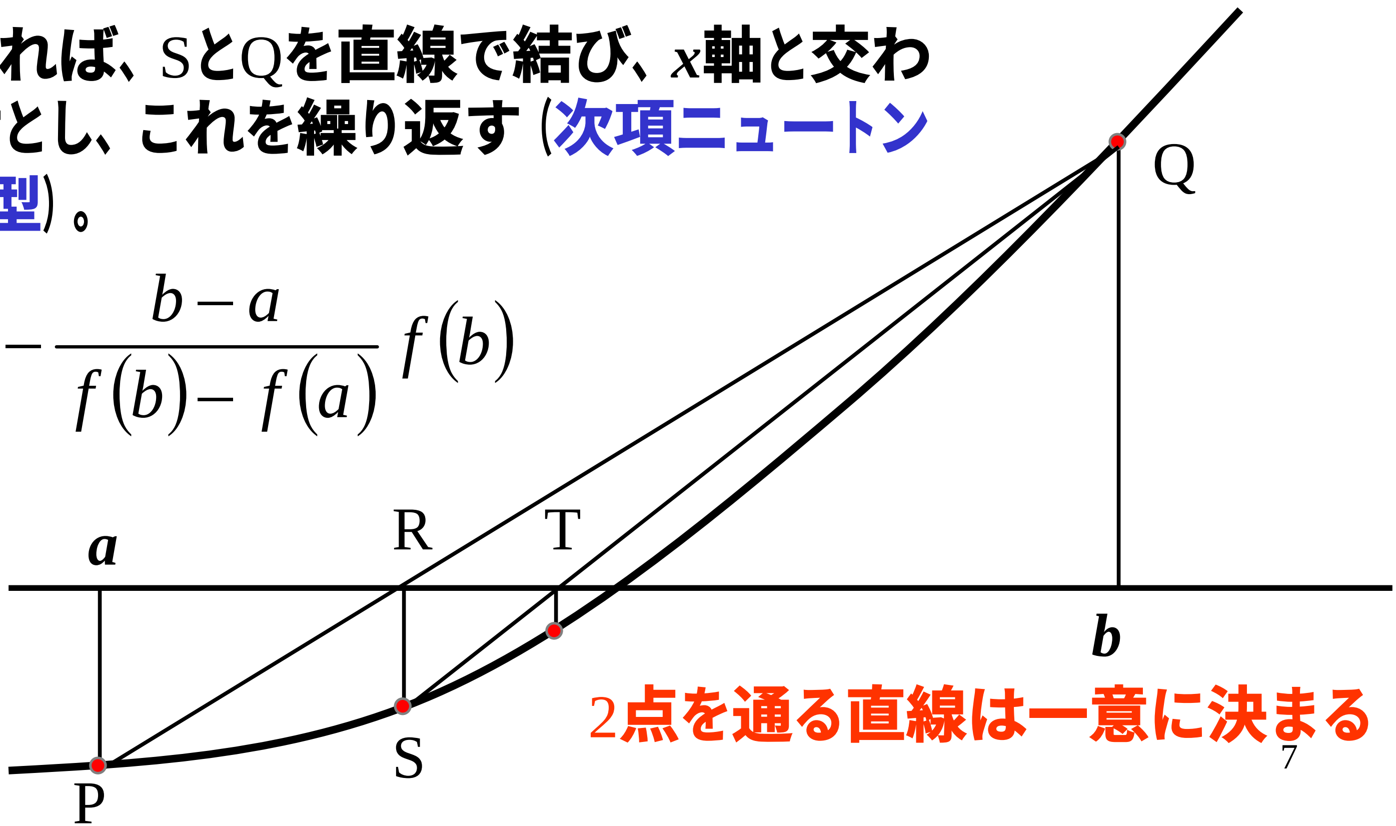
*f(x)*の絶対値も利用

PとQを直線で結び、*x*軸と交わる点をRとする。

R点での*f(x)*を計算し、*f(x)=0*であれば、その点が根となる。

0でなければ、SとQを直線で結び、*x*軸と交わる点をTとし、これを繰り返す（次項ニュートン法の原型）。

$$x_R = b - \frac{b-a}{f(b) - f(a)} f(b)$$



2点を通る直線は一意に決まる

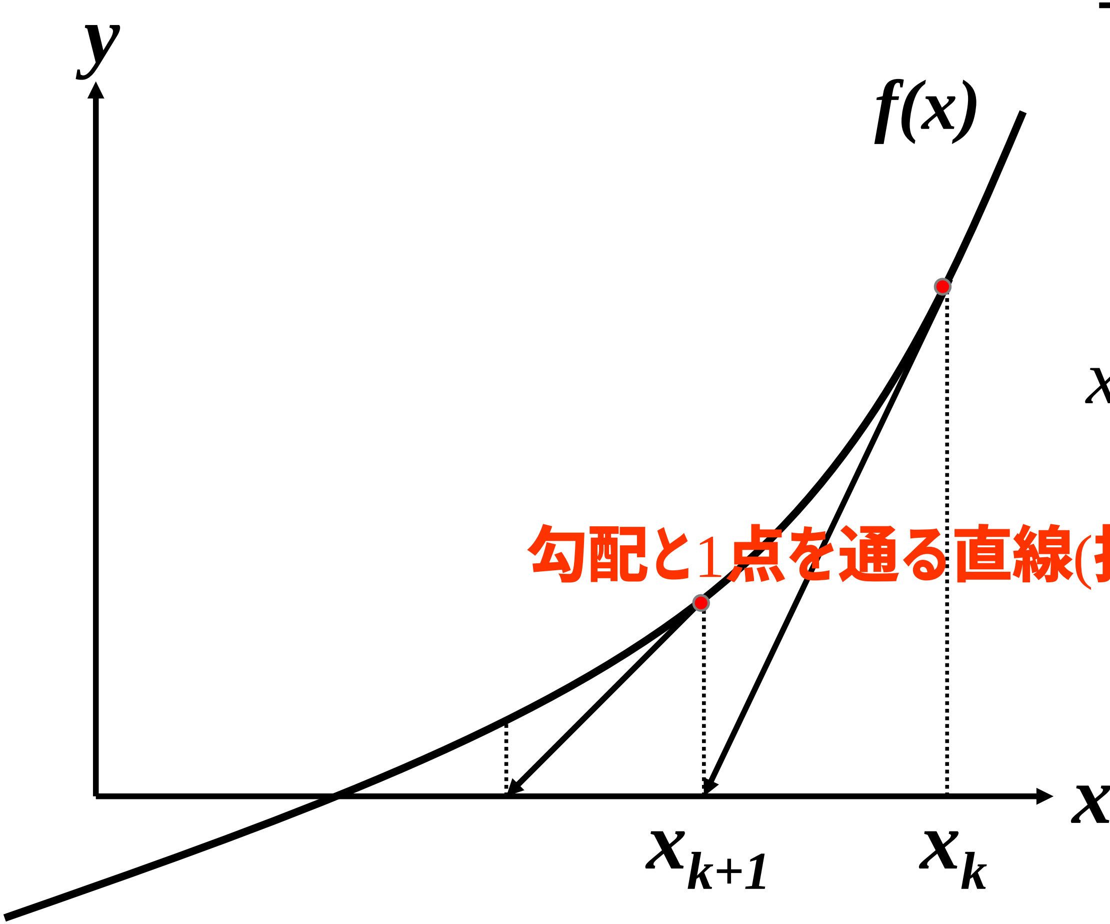
ニュートン(またはNewton-Raphson)法

微係数(勾配)を使う。

$$f(x) = f(x_k) + \frac{f'(x_k)}{1!}(x - x_k) + \frac{f''(x_k)}{2!}(x - x_k)^2 + \ldots$$

高次の項は無視

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$



勾配と1点を通る直線(接線)は一意に決まる

（参考）　多変数への応用

理学工学の分野では重要！

2変数非線形連立方程式

$$f(x,y)=0,$$

$$g(x,y)=0$$

の場合は、ニュートン法は

$$\begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ y^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x}(x^{(k)},y^{(k)}) & \dfrac{\partial f}{\partial y}(x^{(k)},y^{(k)}) \\ \dfrac{\partial g}{\partial x}(x^{(k)},y^{(k)}) & \dfrac{\partial g}{\partial y}(x^{(k)},y^{(k)}) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f(x^{(k)},y^{(k)}) \\ g(x^{(k)},y^{(k)}) \end{pmatrix}$$

となる。

【証明】

$$f(x,y)=f(x_k,y_k)+\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{(x_k,y_k)}(x-x_k)+\left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{(x_k,y_k)}(y-y_k)+\dots$$

$z=f(x,y)$　の(x_k,y_k)における接平面・・・①

$$g(x,y)=g(x_k,y_k)+\left.\frac{\partial g}{\partial x}\right|_{(x_k,y_k)}(x-x_k)+\left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{(x_k,y_k)}(y-y_k)+\dots$$

$z=g(x,y)$　の(x_k,y_k)における接平面・・・②

求めたい近似値は，接平面①②が　xy平面$(z=0)$と交わる点(x_{k+1},y_{k+1})

従って，　連立２元１次方程式

$$f(x_k,y_k)+\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{(x_k,y_k)}(x-x_k)+\left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{(x_k,y_k)}(y-y_k)=0$$

$$g(x_k,y_k)+\left.\frac{\partial g}{\partial x}\right|_{(x_k,y_k)}(x-x_k)+\left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{(x_k,y_k)}(y-y_k)=0 \quad ,$$

を　(x,y)　について解けばそれが　(x_{k+1},y_{k+1})　となる．

$\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{(x_k, y_k)}$ を $\frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y_k)$ などと略記し，行列形式で書き直すと・・

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y_k) & \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y_k) \\ \frac{\partial g}{\partial x}(x_k, y_k) & \frac{\partial g}{\partial y}(x_k, y_k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (x - x_k) \\ (y - y_k) \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} f(x_k, y_k) \\ g(x_k, y_k) \end{bmatrix}$$

よって，

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_k \\ y_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y_k) & \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y_k) \\ \frac{\partial g}{\partial x}(x_k, y_k) & \frac{\partial g}{\partial y}(x_k, y_k) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f(x_k, y_k) \\ g(x_k, y_k) \end{bmatrix}$$

実際には、逆行列の計算は行わなわず、

$$-\begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x}(x_k, y_k) & \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, y_k) \\ \frac{\partial g}{\partial x}(x_k, y_k) & \frac{\partial g}{\partial y}(x_k, y_k) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f(x_k, y_k) \\ g(x_k, y_k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix}$$

とおき・・

連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x}(x^{(k)}, y^{(k)}) & \frac{\partial f}{\partial y}(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ \frac{\partial g}{\partial x}(x^{(k)}, y^{(k)}) & \frac{\partial g}{\partial y}(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} f(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ g(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{pmatrix}$$

を解いて　h_1, h_2 を求め、近似解を更新する

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + h_1,$$
$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + h_2$$

を行い、これを繰り返す

n変数非線形連立方程式

$$
\begin{aligned}
f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0, \\
f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0, \\
&\vdots \\
f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0
\end{aligned}
$$

の場合は、簡単のために、記号

$$x = (x_1, x_2, \ldots, x_n), \qquad f = (f_1, f_2, \ldots, f_n)$$

を導入し、上の方程式を

$$f(x) = 0$$

と書く。

この場合、ニュートン法は

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - H(x^{(k)})^{-1} f(x^{(k)})$$

と書ける。ただし、

$$H(x^{(k)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x^{(k)}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(x^{(k)}) \\ & & \cdots & \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(x^{(k)}) \end{pmatrix}$$

$x^{(k+1)}, \quad x^{(k)}, \quad f(x^{(k)})$ は n次元ベクトルで

であることに注意。

もちろん、実際には、連立一次方程式

$$H(x^{(k)})\,h = -f(x^{(k)})$$

を解き、補正

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + h$$

を行い、これを繰り返す。

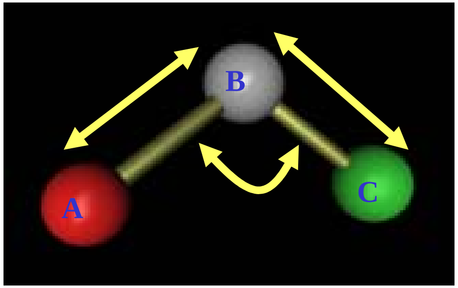
（応用例）ポテンシャル　極値問題

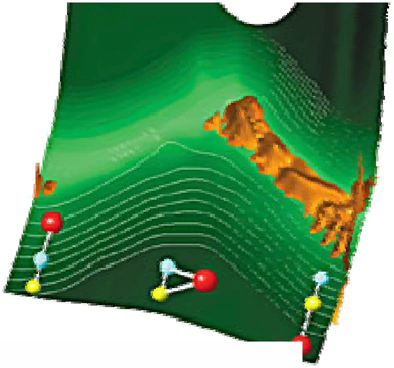
- ポテンシャルエネルギーがV(x，y，z) で与えられた力学系の安定点 (x，y，z) をニュートン法で求める.

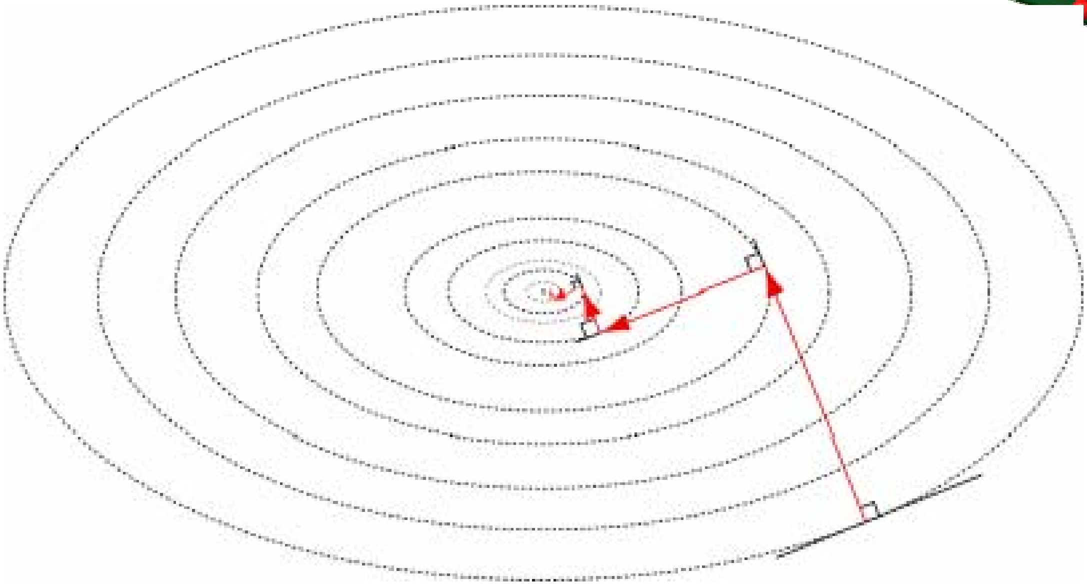
$$v = V(x,y,z) \qquad f(x,y,z) = \frac{\partial V}{\partial x}, \qquad g(x,y,z) = \frac{\partial V}{\partial y}, \quad h(x,y,z) = \frac{\partial V}{\partial z},$$ と書くと・・

安定点，すなわちどの方向への勾配も０となる点を求めるということは，
3変数非線形連立方程式　$f(x,y,z)=0, \quad g(x,y,z)=0, \quad h(x,y,z)=0$　の解
(x,y,z)を求めることと等価である.

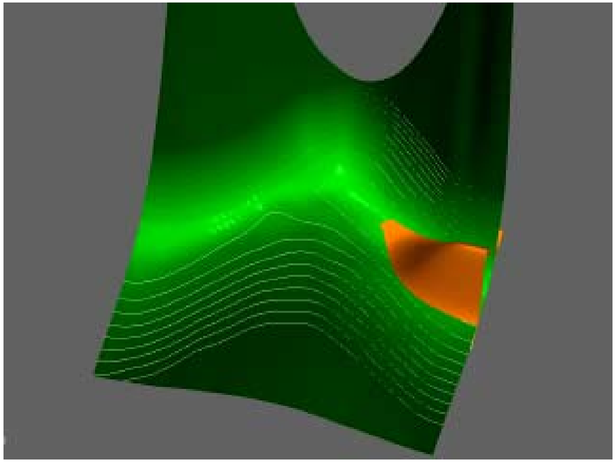
ポテンシャル極値問題としての分子の「かたち」







V（r）：2次元の場合の概念図



2. 代数方程式の解法

代数方程式とは

$$P_n(x) = A_0 x^n + A_1 x^{n-1} + \cdots + A_{n-1} x + A_n = 0$$

代数方程式を解く方法は、いろいろ考えられているが、ここでは グラーフェ (Graeffe) の方法と ベルヌーイ (Bernoulli) の方法を紹介する

2．1　グラーフェの方法

簡単のために、4次の代数方程式を例にとる

$$A_0 x^4 + A_1 x^3 + A_2 x^2 + A_3 x + A_4 = 0$$

4つの解を、 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ (もちろん、複素数)

とし、

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > |\lambda_4|$$

を仮定する

解と係数の間には次のような関係が成り立つ。

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4 = \sigma_1 = -\frac{A_1}{A_0},$$

$$\lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_1\lambda_4 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_2\lambda_4 + \lambda_3\lambda_4 = \sigma_2 = \frac{A_2}{A_0},$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3 + \lambda_1\lambda_2\lambda_4 + \lambda_1\lambda_3\lambda_4 + \lambda_2\lambda_3\lambda_4 = \sigma_3 = -\frac{A_3}{A_0},$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4 = \sigma_4 = \frac{A_4}{A_0}$$

これらの方程式を変形すると、

$$\lambda_1\left(1+\frac{\lambda_2}{\lambda_1}+\frac{\lambda_3}{\lambda_1}+\frac{\lambda_4}{\lambda_1}\right)=\sigma_1,$$

$$\lambda_1\lambda_2\left(1+\frac{\lambda_3}{\lambda_2}+\frac{\lambda_4}{\lambda_2}+\frac{\lambda_3}{\lambda_1}+\frac{\lambda_4}{\lambda_1}+\frac{\lambda_3\lambda_4}{\lambda_1\lambda_2}\right)=\sigma_2,$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3\left(1+\frac{\lambda_4}{\lambda_3}+\frac{\lambda_4}{\lambda_2}+\frac{\lambda_4}{\lambda_1}\right)=\sigma_3,$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4=\sigma_4$$

が得られる

したがって、

$$\lambda_1 \approx \sigma_1 = -\frac{A_1}{A_0},$$

$$\lambda_2 \approx \frac{\sigma_2}{\sigma_1} = -\frac{A_2}{A_1},$$

$$\lambda_3 \approx \frac{\sigma_3}{\sigma_2} = -\frac{A_3}{A_2},$$

$$\lambda_4 \approx \frac{\sigma_4}{\sigma_3} = -\frac{A_4}{A_3}$$

が得られる

次に、

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \approx |\lambda_3| > |\lambda_4|$$

の場合を考えよう。この場合は次のように変形する

$$\lambda_1(1+\frac{\lambda_2}{\lambda_1}+\frac{\lambda_3}{\lambda_1}+\frac{\lambda_4}{\lambda_1}) = \sigma_1,$$

$$\lambda_1(\lambda_2+\lambda_3)(1+\frac{\lambda_4}{\lambda_2+\lambda_3}+\frac{\lambda_4}{\lambda_1}+\frac{\lambda_3\lambda_4}{\lambda_1(\lambda_2+\lambda_3)}) = \sigma_2,$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3(1+\frac{\lambda_4}{\lambda_3}+\frac{\lambda_4}{\lambda_2}+\frac{\lambda_4}{\lambda_1}) = \sigma_3,$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4 = \sigma_4$$

したがって、

$$\lambda_1 \approx \sigma_1 = -\frac{A_1}{A_0},$$

$$\lambda_2 + \lambda_3 \approx \frac{\sigma_2}{\sigma_1} = -\frac{A_2}{A_1},$$

$$\lambda_2 \lambda_3 \approx \frac{\sigma_3}{\sigma_1} = \frac{A_3}{A_1},$$

$$\lambda_4 \approx \frac{\sigma_4}{\sigma_1} = -\frac{A_4}{A_3}$$

が得られる

いま述べた方法では精度がよくない‥
そこで、次のように考える

$$\lambda_1^2, \lambda_2^2, \lambda_3^2, \lambda_4^2$$

が満たす方程式を構成できないか。
もし構成できたら、

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > |\lambda_4|$$

の場合、たとえば、

$$1 > \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| > \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^2 = \left|\frac{\lambda_2^2}{\lambda_1^2}\right|$$

一般に

$$\lambda_1^2,\ \lambda_2^2,\ \lambda_3^2,\ \lambda_4^2$$

$$\lambda_1^4,\ \lambda_2^4,\ \lambda_3^4,\ \lambda_4^4$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\lambda_1^{2^p},\lambda_2^{2^p},\lambda_3^{2^p},\lambda_4^{2^p}$$

が満たす代数方程式を構成できないか

$$\lambda_1^2,\ \lambda_2^2,\ \lambda_3^2,\ \lambda_4^2$$

が解となるような代数方程式の多項式を

$$f_4(x) = B_0 x^4 + B_1 x^3 + B_2 x^2 + B_3 x + B_4$$

とする。そうすると、

$$\lambda_1^2 \approx -\frac{B_1}{B_0}, \quad \lambda_2^2 \approx -\frac{B_2}{B_1},$$

$$\lambda_3^2 \approx -\frac{B_3}{B_2}, \quad \lambda_4^2 \approx -\frac{B_4}{B_3}$$

が成り立つ

一般に、

$$\lambda_1^{2^p}, \lambda_2^{2^p}, \cdots, \lambda_n^{2^p}$$

が満たす代数方程式の多項式のつくり方

まず、

$$P_n(x) = A_0(x-\lambda_1)(x-\lambda_2)\cdots(x-\lambda_n)$$

より

$$P_n(-x) = (-1)^n A_0(x+\lambda_1)(x+\lambda_2)\cdots(x+\lambda_n)$$

2つの多項式をかけ合わせると、

$$(-1)^n P_n(x) P_n(-x) = A_0^2 (x^2 - \lambda_1{}^2)(x^2 - \lambda_2{}^2) \cdots (x^2 - \lambda_n{}^2)$$

ここで

$$X = x^2$$

とおくと、 X に関する n 次の多項式

$$Q_n(X) = A_0^2 (X - \lambda_1{}^2)(X - \lambda_2{}^2) \cdots (X - \lambda_n{}^2)$$

が得られる

$Q_n(X)$ を新たに $P_n(x)$ とみなせば、
同じ議論を繰り返すことができる。

さて、問題は $Q_n(X)$ の**係数**を $P_n(x)$ の係数からどのようにして求めるか、である。そのために、

$$(-1)^n P_n(x) P_n(-x)$$

を計算すると、

$$(-1)^n P_n(x) P_n(-x) = A_0^2 X^n + (-A_1^2 + 2A_0 A_2) X^{n-1} + (A_2^2 - 2A_1 A_3 + 2A_0 A_4) X^{n-2} + \cdots$$

一方、

$$Q_n(X) = B_0 X^n + B_1 X^{n-1} + B_2 X^{n-2} + \cdots$$

と書くと、係数比較することにより、

$$B_0 = A_0^2,$$

$$B_1 = -A_1^2 + 2A_0 A_2,$$

$$B_2 = A_2^2 - 2A_1 A_3 + 2A_0 A_4,$$

$$\cdots$$

が得られる（一般の式を導く→演習）

2．2　ベルヌーイの方法（参考）

$$P_n(x) = A_0 x^n + A_1 x^{n-1} + \cdots + A_n = 0$$

仮定：　$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$

$$S_k = \lambda_1^k + \lambda_2^k + \cdots + \lambda_n^k$$

とおく。このとき、

$$S_k = \lambda_1^k (1 + (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^k + \cdots + (\frac{\lambda_n}{\lambda_1})^k),$$

$$S_{k+1} = \lambda_1^{k+1} (1 + (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^{k+1} + \cdots + (\frac{\lambda_n}{\lambda_1})^{k+1})$$

これより、

$$\lambda_1 = \lim_{k \to \infty} \frac{S_{k+1}}{S_k}$$

が求まる。**問題**は、 S_k を如何にして計算するか、である。 S_k が満たす**漸化式**を導く必要がある。そのためには

$$P_n(x) = A_0 x^n + A_1 x^{n-1} + \cdots + A_n \qquad (1)$$

と

$$P_n(x) = A_0 (x - \lambda_1)(x - \lambda_2) \cdots (x - \lambda_n) \qquad (2)$$

をフルに活用しなくてはならない。

まず、(2) を展開すると

$$P_n(x) = A_0\Big(x^n - (\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots \lambda_n)x^{n-1} + \cdots + (-1)^k \sum_{i_1<i_2<\cdots<i_k} \lambda_{i_1}\lambda_{i_2}\cdots\lambda_{i_k} x^{n-k} + \cdots + (-1)^n \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n\Big) \qquad (3)$$

(1) と (3) の係数を比較すると、

$$A_1 = A_0(-1)^1(\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots \lambda_n)$$

$$\vdots$$

$$A_k = A_0(-1)^k \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_k} \lambda_{i_1}\lambda_{i_2} \cdots \lambda_{i_k} \tag{4}$$

$$\vdots$$

$$A_{n-1} = A_0(-1)^{n-1} \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_{n-1}} \lambda_{i_1}\lambda_{i_2} \cdots \lambda_{i_{n-1}}$$

$$= A_0(-1)^{n-1} \sum_{m=1}^{n} \frac{\lambda_1\lambda_2 \cdots \lambda_n}{\lambda_m}$$

$$A_n = A_0(-1)^n \lambda_1\lambda_2 \cdots \lambda_n$$

さて、(1) の $P_n(x)$ を次のように書き換える。

$$P_n(x) = x P_{n-1}(x) + A_n.$$

ただし、 $P_{n-1}(x)$ は

$$P_{n-1}(x) = A_0 x^{n-1} + A_1 x^{n-2} + \cdots + A_{n-1} \qquad (5)$$

で与えられる。

一方、(3) の $P_{n-1}(x)$ に相当する部分は

$$\frac{P_n(x) - A_0(-1)^n \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n}{x}$$

$$= \frac{A_0(x-\lambda_1)(x-\lambda_2)\cdots(x-\lambda_n) - A_0(-1)^n \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n}{x}$$

となる。したがって、(5) より、

$$A_0 x^{n-1} + A_1 x^{n-2} + \cdots + A_{n-1}$$

$$= \frac{A_0(x-\lambda_1)(x-\lambda_2)\cdots(x-\lambda_n) - A_0(-1)^n \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n}{x}$$

が成り立つ。

ここで両辺の x に λ_m を代入して $m=1$ から $m=n$ まで加えると

$$A_0 S_{n-1} + A_1 S_{n-2} + \cdots + nA_{n-1} = A_0 (-1)^{n-1} \sum_{m=1}^{n} \frac{\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n}{\lambda_m}$$

が得られる。さらに右辺は、（4）より、

$$A_0 (-1)^{n-1} \sum_{m=1}^{n} \frac{\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n}{\lambda_m} = A_0 (-1)^{n-1} \sum_{m=1}^{n} \lambda_1 \lambda_2 \cdots \breve{\lambda}_m \cdots \lambda_n = A_{n-1}$$

したがって、

$$A_0 S_{n-1} + A_1 S_{n-2} + \cdots + (n-1) A_{n-1} = 0$$

こんどは、

$$P_n(x) = x\,P_{n-1}(x) + A_n$$

の $P_{n-1}(x)$ を

$$P_{n-1}(x) = x\,P_{n-2}(x) + A_{n-1}$$

のように書き換える。ただし、$P_{n-2}(x)$ は

$$P_{n-2}(x) = A_0 x^{n-2} + A_1 x^{n-3} + \cdots + A_{n-2} \tag{6}$$

で与えられる。

一方、(3) の $P_{n-2}(x)$ に相当する部分は

$$P_{n-2}(x)$$

$$= \frac{P_n(x)}{x^2} - A_0(-1)^{n-1} \sum_{i_1<i_2<\cdots<i_{n-1}} \frac{\lambda_{i_1}\lambda_{i_2}\cdots\lambda_{i_{n-1}}}{x} - \frac{A_0(-1)^n \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n}{x^2}$$

となる。 ここで両辺の x に λ_m を代入して
$m=1$ から $m=n$ まで加えると

$$A_0 S_{n-2} + A_1 S_{n-3} + \cdots + nA_{n-2}$$

$$= A_0(-1)^{n-2} \sum_{m=1}^{n} \sum_{i_1<i_2<\cdots<i_{n-1}} \frac{\lambda_{i_1}\lambda_{i_2}\cdots\lambda_{i_{n-1}}}{\lambda_m} + A_0(-1)^{n-1} \sum_{m=1}^{n} \frac{\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n}{\lambda_m^2}$$

さらに、

$$A_0(-1)^{n-2}\sum_{m=1}^{n}\sum_{i_1<i_2<\cdots<i_{n-1}}\frac{\lambda_{i_1}\lambda_{i_2}\cdots\lambda_{i_{n-1}}}{\lambda_m}+A_0(-1)^{n-1}\sum_{m=1}^{n}\frac{\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n}{\lambda_m^2}$$

$$=A_0(-1)^{n-2}\sum_{m=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_j\cdots\lambda_m\cdots\lambda_n}{\lambda_m}+A_0(-1)^{n-1}\sum_{m=1}^{n}\frac{\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_m\cdots\lambda_n}{\lambda_m}$$

$$=A_0(-1)^{n-2}\sum_{m=1}^{n}\left(\sum_{j\neq m}\frac{\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_j\cdots\lambda_m\cdots\lambda_n}{\lambda_m}+\frac{\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_m\cdots\lambda_n}{\lambda_m}\right)$$

$$+A_0(-1)^{n-1}\sum_{m=1}^{n}\frac{\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_m\cdots\lambda_n}{\lambda_m}$$

$$= A_0(-1)^{n-2}\sum_{m=1}^{n}\left(\sum_{j\neq m}\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_j\cdots\breve{\lambda}_m\cdots\lambda_n\right)$$

$$= A_0(-1)^{n-2}\sum_{m=1}^{n}\left(\sum_{j<m}\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_j\cdots\breve{\lambda}_m\cdots\lambda_n+\sum_{j>m}\lambda_1\cdots\breve{\lambda}_m\cdots\breve{\lambda}_j\cdots\lambda_n\right)$$

$$= 2A_0(-1)^{n-2}\sum_{i_1<i_2<\cdots<i_{n-2}}\lambda_{i_1}\lambda_{i_2}\cdots\lambda_{i_{n-2}}$$

$$= 2A_{n-2}$$

したがって、

$$A_0S_{n-2}+A_1S_{n-3}+\cdots+(n-2)A_{n-2}=0$$

が得られる。

これらは、 S_k に関する漸化式である。
ただし、$S_1, S_2, \ldots, S_{n-1}$ しか計算できない。
極限をとる必要があるので、 $S_p\ (p \geq n)$
を求めなければならない。そのために、

$$P_n(x) = 0$$

の両辺に x^{p-n} をかけて

$$x^{p-n}P_n(x) = A_0 x^p + A_1 x^{p-1} + \cdots + A_n x^{p-n} = 0$$

をつくり、漸化式

$$\sum_{m=1}^{n} \lambda_m^{p-n} P_n(\lambda_m) = A_0 S_p + A_1 S_{p-1} + \cdots + A_n S_{p-n} = 0,$$

$$p \geq n$$

を加える。

これらの漸化式から λ_1 が求まったら

$$Q_{n-1}(x) = \frac{P_n(x)}{x - \lambda_1}$$

を計算し、多項式の次数をひとつ落として
新しい多項式に対して上述の手続きを繰り返す。

もちろん、$Q_{n-1}(x)$ の係数を求めなくてはならない。

$$Q_{n-1}(x) = B_0 x^{n-1} + B_1 x^{n-2} + \cdots + B_{n-1}$$

と書き、係数を

$$P_n(x) = (x - \lambda_1) Q_{n-1}(x)$$

の両辺の係数を比較することによって求める。

$$\begin{aligned} B_0 &= A_0 \\ B_1 &= A_1 + \lambda_1 B_0 \\ B_2 &= A_2 + \lambda_1 B_1 \\ &\vdots \\ B_{n-1} &= A_{n-1} + \lambda_1 B_{n-2} \end{aligned}$$

3．連立一次方程式の解法

序論

連立１次方程式の重要性

種々の現象（社会現象、自然現象）

↓

微分方程式（偏微分方程式）

通常、理論的には、
解けない。

↓

差分法により連立１次方程式に帰着

次数が100000次元以上に
なることもしばしばある。

基本的な偏微分方程式の例

ラプラス方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}=0$$

ポアソン方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}= f(x, y, z)$$

拡散方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}=k\frac{\partial u}{\partial t}$$

偏導関数を差分で表現する

$$
u(x, y) \quad \begin{cases} x_n = x_0 + nh & (n = 0, 1, \cdots, N-1) \\ y_n = y_0 + nh & (n = 0, 1, \cdots, N-1) \end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial}{\partial x} u(x_n, y_m) = \dfrac{u(x_{n+1}, y_m) - u(x_n, y_m)}{h} \\[2ex]
\dfrac{\partial}{\partial y} u(x_n, y_m) = \dfrac{u(x_n, y_{m+1}) - u(x_n, y_m)}{k} \\[2ex]
\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} u(x_n, y_m) = \dfrac{u(x_{n+1}, y_m) - 2u(x_n, y_m) + u(x_{n-1}, y_m)}{h^2} \\[2ex]
\dfrac{\partial^2}{\partial y^2} u(x_n, y_m) = \dfrac{u(x_n, y_{m+1}) - 2u(x_n, y_m) + u(x_n, y_{m-1})}{k^2}
\end{cases}
$$

連立一次方程式　　ex. $\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = f(x)$

$$u(x_2) - 2u(x_1) + u(x_0) = h^2 f(x_1)$$

$$u(x_3) - 2u(x_2) + u(x_1) = h^2 f(x_2)$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$u(x_{n+1}) - 2u(x_n) + u(x_{n-1}) = h^2 f(x_n)$$

$$\begin{pmatrix} & & & \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x_0) \\ u(x_1) \\ u(x_2) \\ u(x_3) \end{pmatrix} = h^2 \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \end{pmatrix}$$

●２次元拡散（熱伝導）方程式の場合・・

２次元の場合も基本的には１次元と同様である。鉄板の温度分布の時間的変化を考える。

独立変数：時刻t、鉄板上の位置x,y
未知関数：時刻t における点(x,y)での、鉄板での温度$u(t,x,y)$
パラメータ：熱伝導率k、鉄板の比熱σ、鉄板の面密度 ρ
表現する法則：熱量の保存則

$$\sigma\rho\frac{\partial u}{\partial t}=k\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)$$

$$\frac{k}{\sigma\rho}=1.0$$

$$\frac{\partial u(x_n, y_m, t_l)}{\partial t} = \frac{u(x_n, y_m, t_{l+1}) - u(x_n, y_m, t_l)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x_n, y_m, t_l) = \frac{u(x_{n+1}, y_m, t_l) - 2u(x_n, y_m, t_l) + u(x_{n-1}, y_m, t_l)}{h^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} u(x_n, y_m, t_l) = \frac{u(x_n, y_{m+1}, t_l) - 2u(x_n, y_m, t_l) + u(x_n, y_{m-1}, t_l)}{k^2}$$

初期条件と境界条件(Dirichlet境界条件)

$1 \le n \le N - 1$

$1 \le m \le N - 1$

$0 \le l$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y)$$

$$u(x_N, 0, t) = 0 \quad u(0, y_N, t) = 0$$

$$u(x_N, y_N, t) = 0$$

$$1 \le n \le 3 \quad 1 \le m \le 3 \quad t = 0$$

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{110} \\ u_{120} \\ u_{130} \\ u_{210} \\ u_{220} \\ u_{230} \\ u_{310} \\ u_{320} \\ u_{330} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{110} \\ f_{120} \\ f_{130} \\ f_{210} \\ f_{220} \\ f_{230} \\ f_{310} \\ f_{320} \\ f_{330} \end{pmatrix}$$

$$f_{110} = u_{010} + u_{100} \quad f_{120} = u_{020} \quad f_{130} = u_{030}$$

$$f_{210} = u_{200} \quad f_{220} = 0 \quad f_{230} = 0 \quad f_{310} = u_{300}$$

$$f_{320} = 0 \quad f_{330} = 0$$

$$1 \le n \le 3 \quad 1 \le m \le 3 \quad l = 0 \to 1$$

$$\begin{pmatrix} \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h^{-2} & \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h^{-2} & \lambda & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & 0 \\ h^{-2} & 0 & 0 & \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & 0 & 0 & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & \lambda & h^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{110} \\ u_{120} \\ u_{130} \\ u_{210} \\ u_{220} \\ u_{230} \\ u_{310} \\ u_{320} \\ u_{330} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{111} \\ f_{121} \\ f_{131} \\ f_{211} \\ f_{221} \\ f_{231} \\ f_{311} \\ f_{321} \\ f_{331} \end{pmatrix}$$

$$f_{111} = u_{111} - u_{010} - u_{100} \quad f_{121} = u_{121} - u_{020} \quad f_{131} = u_{131} - u_{030}$$

$$f_{211} = u_{211} - u_{200} \quad f_{221} = u_{221} \quad f_{231} = u_{231} \quad f_{311} = u_{311} - u_{300}$$

$$f_{321} = u_{321} \quad f_{331} = u_{331} \qquad \lambda = \Delta t^{-1} - 4h^{-2}$$

数値解析で用いる連立1次方程式の特徴

未知数が非常に多くなることが多い

係数マトリクスが対称マトリクスになることが多い

(i,j)成分と(j,i)成分の値が等しい正方マトリクス

係数マトリクスは対角要素近くのみに0でない値の入ったバンドマトリクス（帯行列）になることも多い

$$
\begin{bmatrix}
* & * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
* & * & * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
* & * & * & * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & * & * & * & * & * & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & * & * & * & * & * & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & * & * & * & * & * & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & * & * & * & * & * & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * & * & * & * & * \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * & * & * & * \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * & * & *
\end{bmatrix}
$$

連立1次方程式の解法

連立1次方程式の解法は、直接法と間接法（反復法）に主に分類できる

直接法

方程式を何らかの形で直接的に解く方法である。理論的には有限回の演算によって解が得られるが、演算に丸めの誤差が生じる可能性がある

反復法（間接法）

方程式をトライアル・アンド・エラーで解いていく方法。間接法では、丸めの誤差が生じる可能性はほとんどないが、解の収束性は必ずしも保証されないので、実際には適当な近似解で反復を打ち切る必要がある

クラメル(Cramer)の公式

連立1次方程式を解く基礎的な方法であるが高次元では使い物にならない・・

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 5 \\ 12 \\ 27 \end{Bmatrix}$$

$$x = \frac{\begin{vmatrix} 5 & 1 & -1 \\ 12 & 2 & 2 \\ 27 & 1 & 5 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 5 \end{vmatrix}} \qquad y = \frac{\begin{vmatrix} 3 & 5 & -1 \\ -1 & 12 & 2 \\ 2 & 27 & 5 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 5 \end{vmatrix}} \qquad z = \frac{\begin{vmatrix} 3 & 1 & 5 \\ -1 & 2 & 12 \\ 2 & 1 & 27 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 5 \end{vmatrix}}$$

3行3列程度の行列式は、いわゆる「たすき掛け法」で容易に計算できる。

$$\left|\begin{array}{ccc|cc} 3 & 1 & -1 & 3 & 1 \\ -1 & 2 & 2 & -1 & 2 \\ 2 & 1 & 5 & 2 & 1 \end{array}\right.$$

$$3\times 2\times 5+1\times 2\times 2+(-1)\times(-1)\times 1-(-1)\times 2\times 2-3\times 2\times 1-1\times(-1)\times 5$$

$$x=\frac{76}{38}=2 \qquad y=\frac{114}{38}=3 \qquad z=\frac{152}{38}=4$$

4元以上になると「たすき掛け法」は適用できない。(小行列式に分解)

10元の場合でさえ、3億6000万回の掛け算が必要 ⇨ 実用的でない。

Gaussの消去法の導入編

Step 1

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & -1/2 \\ -1 & 0 & 2 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & -1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/4 \\ 1/8 \\ 1/8 \\ 1/12 \end{Bmatrix}$$

第1行の方程式を何倍かし、それを第2行以下の方程式から引き、
第2行以下の方程式の第1列の成分が0になるようにする。

すなわち、第1行の-1/4倍を第2行から引く
第1行の-1/4倍を第3行から引く
第1行の　0倍を第4行から引く

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 7/4 & -1/4 & -1/2 \\ 0 & -1/4 & 7/4 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & -1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/4 \\ 3/16 \\ 3/16 \\ 1/12 \end{Bmatrix}$$

Step 2

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 7/4 & -1/4 & -1/2 \\ 0 & -1/4 & 7/4 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & -1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/4 \\ 3/16 \\ 3/16 \\ 1/12 \end{Bmatrix}$$

同様に、　第2行の方程式の-1/7**倍を第3行の方程式から引き、**
第2行の方程式の-2/7**倍を第4行の方程式から引く。**

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 7/4 & -1/4 & -1/2 \\ 0 & 0 & 12/7 & -4/7 \\ 0 & 0 & -4/7 & 6/7 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/4 \\ 3/16 \\ 3/14 \\ 23/168 \end{Bmatrix}$$

Step 3

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 7/4 & -1/4 & -1/2 \\ 0 & 0 & 12/7 & -4/7 \\ 0 & 0 & -4/7 & 6/7 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/4 \\ 3/16 \\ 3/14 \\ 23/168 \end{Bmatrix}$$

第3行の方程式の-1/3**倍を第4行の方程式から引く。**

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 7/4 & -1/4 & -1/2 \\ 0 & 0 & 12/7 & -4/7 \\ 0 & 0 & 0 & 2/3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/4 \\ 3/16 \\ 3/14 \\ 5/24 \end{Bmatrix}$$

Step 4

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 7/4 & -1/4 & -1/2 \\ 0 & 0 & 12/7 & -4/7 \\ 0 & 0 & 0 & 2/3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1/4 \\ 3/16 \\ 3/14 \\ 5/24 \end{Bmatrix}$$

上式の方程式では、u_4, u_3, u_2, u_1の順に次々と未知数を求めることができる。

$$u_4 = \frac{5}{24} \times \frac{3}{2} = \frac{5}{16}$$

$$u_3 = \frac{3/14 - (-4/7)u_4}{12/7} = \left\{ \frac{3}{14} - \left(-\frac{4}{7} \right) \frac{5}{16} \right\} \frac{7}{12} = \frac{11}{48}$$

$$u_2 = \left\{ \frac{3}{16} - \left(\frac{1}{4} \right) \frac{11}{48} - \left(-\frac{1}{2} \right) \frac{5}{16} \right\} \frac{4}{7} = \frac{11}{48}$$

$$u_1 = \left\{ \frac{1}{4} - (-1)\frac{11}{48} - (-1)\frac{11}{48} \right\} \frac{1}{4} = \frac{17}{96}$$

Gauss の消去法 （まず3次元の場合で練習）

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{14} \\ a_{24} \\ a_{34} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{pmatrix}$$

$$a_{11} \neq 0$$

$$\frac{a_{21}}{a_{11}} \times \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{pmatrix}$$

$$a_{22}^{(2)} = a_{22} - \frac{a_{21}a_{12}}{a_{11}}, \quad a_{23}^{(2)} = a_{23} - \frac{a_{21}a_{13}}{a_{11}}, \quad a_{24}^{(2)} = a_{24} - \frac{a_{21}a_{14}}{a_{11}}$$

$$a_{2j}^{(2)} = a_{2j} - \frac{a_{21}a_{1j}}{a_{11}}, \quad j = 2, 3, 4$$

$$\frac{a_{31}}{a_{11}} \times \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \end{pmatrix}$$

$$a_{32}^{(2)} = a_{32} - \frac{a_{31}a_{12}}{a_{11}}, \quad a_{33}^{(2)} = a_{33} - \frac{a_{31}a_{13}}{a_{11}}, \quad a_{34}^{(2)} = a_{34} - \frac{a_{31}a_{14}}{a_{11}}$$

$$a_{3j}^{(2)} = a_{3j} - \frac{a_{31}a_{1j}}{a_{11}}, \quad j = 2, 3, 4$$

$$a_{22}^{(2)} \neq 0$$

$$\frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \times \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & a_{34}^{(3)} \end{pmatrix}$$

$$a_{33}^{(3)} = a_{33}^{(2)} - \frac{a_{32}^{(2)} a_{23}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \quad a_{34}^{(3)} = a_{34}^{(2)} - \frac{a_{32}^{(2)} a_{24}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$$

$$a_{3j}^{(3)} = a_{3j}^{(2)} - \frac{a_{32}^{(2)} a_{2j}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \quad j = 3, 4$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{14} \\ a_{24}^{(2)} \\ a_{34}^{(3)} \end{pmatrix}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad a_{ij}^{(1)} = a_{ij},$$

$$i = k+1, \ldots, 3, \quad j = k+1, \ldots, 4, \quad k = 1, 2$$

$$
\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{14}^{(1)} \\ a_{24}^{(2)} \\ a_{34}^{(3)} \end{pmatrix}
$$

$\uparrow$

上半三角行列

もし $a_{11}^{(1)} \neq 0, \quad a_{22}^{(2)} \neq 0, \quad a_{33}^{(3)} \neq 0$ ならば

$$x_3 = \frac{a_{34}^{(3)}}{a_{33}^{(3)}},$$

$$x_2 = \frac{1}{a_{22}^{(2)}}(a_{24}^{(2)} - a_{23}^{(2)} x_3),$$

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}^{(1)}}(a_{14}^{(1)} - a_{12}^{(1)} x_2 - a_{13}^{(1)} x_3)$$

N次元の場合へ一般化する

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1,n+1} \\ a_{2,n+1} \\ \vdots \\ a_{n,n+1} \end{pmatrix}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad a_{ij}^{(1)} = a_{ij},$$

$$i = k+1, \dots, n, \quad j = k+1, \dots, n+1, \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

$$x_n = \frac{a_{n,n+1}^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}},$$

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}^{(k)}} (a_{k,n+1}^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j), \quad k = n-1, \dots, 1$$