2005年4月27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･･．

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

●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

ポアソン方程式の代表例

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

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

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

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

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

初期条件と境界条件(Dirichlet境界条件)

$$1 \le n \le N-1 \qquad u(x, y, 0) = u_0(x, y)$$

$$1 \le m \le N-1 \qquad u(x_N, 0, t) = 0 \quad u(0, y_N, t) = 0$$

$$0 \le l \qquad u(x_N, y_N, t) = 0$$

x, y方向に３分割した場合　$1 \le n \le 3 \quad 1 \le m \le 3 \quad t = 0$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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<u>対称マトリクス</u>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

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

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演算量の推定が可能である．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逐次法の一種。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．実際には要求精度を満足する近似解で反復を打ち切る必要がある

そのほか，計算機の主記憶(メモリ)容量や演算器の種類(スカラ,ベクトル)および効率の良い並列アルゴリズムの有無など，直接法vs間接法それぞれに向き不向きがある．

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)

0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の消去法の概要

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。

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

ここがゼロになる
ように変形する

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

(一般式を導く前にまず3次元の場合で練習)

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

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

$a_{11} \neq 0$とする（$|a_{11}|$が0に近い場合は後述のピボット操作を参照）

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

よって，3次元の場合の一般式は以下のようになる.

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

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

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

【ピボットについて】

注意 $a_{11}^{(1)}, a_{22}^{(2)}, a_{33}^{(3)}$ **のそれぞれをピボットという．ピボットが 0 になることがある．もし** $a_{11}^{(1)}=0$ **のときは第2行目か第3行目の方程式と入れ替える．** $a_{22}^{(2)}=0$ **のときも 同様．**

$|a_{ii}|$が極端に小さい場合にも，
丸め誤差が大きくなるためピボット操作を行う場合がある．

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

$\uparrow$

上半三角行列に変形できれば
あとは後の解から順次解が求まる（後進代入）

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

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

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

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

次に　N次元の場合へ一般化する

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

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

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

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

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

Gaussの消去法のプログラミング

【記号】　連立1次方程式を次のように成分表示する。

$$
\begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1m} \\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2m} \\
a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3m} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots & a_{mm}
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_m \end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_m \end{Bmatrix}
$$

前進消去

$$i = 1 \rightarrow m-1$$

$$j = i+1 \rightarrow m$$

$$f_j = f_j - \left(\frac{a_{ji}}{a_{ii}}\right) f_i$$

$$k = i+1 \rightarrow m$$

$$a_{jk} = a_{jk} - \left(\frac{a_{ji}}{a_{ii}}\right) a_{ik}$$

後退代入

$$u_m = \frac{f_m}{a_{mm}}$$

$$i = m-1 \rightarrow 1 \qquad (\boldsymbol{i} \text{ が減少する順})$$

$$j = i+1 \rightarrow m$$

$$f_i = f_i - a_{ij} f_j$$

$$f_i = f_i - \sum_{j=j+1}^{m} a_{ij}$$

$$u_i = \frac{f_i}{a_{ii}}$$

Gaussの消去法のプログラミング (対称)

係数マトリクスが対称であれば、計算を節約できる。

前進消去での変形の部分を見ると、$a_{ji}=a_{ij}$ となることがわかる。

前進消去

$$i = 1 \rightarrow m-1$$

$$j = i+1 \rightarrow m$$

$$f_j = f_j - \left(\frac{a_{ji}}{a_{ii}}\right) f_i$$

$$k = i+1 \rightarrow m$$

$$a_{jk} = a_{jk} - \left(\frac{a_{ji}}{a_{ii}}\right) a_{ik}$$

a_{ij}

j

Gaussの消去法のプログラム(fortran版)

【非対称マトリクス】

```
'*****  前進消去  *****

FOR I=1 TO M-1
     FOR J=I+1 TO M
          AA=A(J,I)/A(I,I)
          F(J)=F(J)-AA*F(I)
          FOR K=1 TO M
               A(J,K)=A(J,K)-AA*A(I,K)
          NEXT K
     NEXT J
NEXT I

'*****  後退代入  *****

F(M)=F(M)/A(M,M)
FOR I=M-1 TO 1 STEP –1
     FOR J=I+1 TO M
          F(I)=F(I)-A(I,J)*F(J)
     NEXT J
     F(I)=F(I)/A(I,I)
NEXT I
```

【対称マトリクス】

```
'*****  前進消去  *****

FOR I=1 TO M-1
     FOR J=I+1 TO M
          AA=A(I,J)/A(I,I)
          F(J)=F(J)-AA*F(I)
          FOR K=J TO M
               A(J,K)=A(J,K)-AA*A(I,K)
          NEXT K
     NEXT J
NEXT I

'*****  後退代入  *****

F(M)=F(M)/A(M,M)
FOR I=M-1 TO 1 STEP –1
     FOR J=I+1 TO M
          F(I)=F(I)-A(I,J)*F(J)
     NEXT J
     F(I)=F(I)/A(I,I)
NEXT I
```