線形計算を今一度

SHIMURA Masato
JCD02773@nifty.com

2020 年 1 月 28 日

はじめに

J の/math/misc に各種の数学関数や util が入っている。線形数学に関する部分は相当ラフスポットで使い込むには使い慣れた教科書で確認を行う必要がある。

1　ガウスの掃き出し法

ガウスの掃き出し法 (elimination) は鉄板で, 最後の防壁と言われる

1.1　線形連立方程式と掃き出し法

1. 例題/キーポイント線形代数 P.6

$$\begin{cases} 2x + y + z = 15 \\ 4x + 2y + 5z = 39 \\ 8x + 8y + 9z = 83 \end{cases}$$

```
   K0
2 1 1 15
4 2 5 39
8 8 9 83
```

2. 最初に手慣れたクラメール法で解を確認しておく

```
   cr K0
1 0 0 5
0 1 0 2
0 0 1 3
```

```
cr=:%. }:"1
```

クラメール法の概念を現すと次の通りで拡大係数行列を係数行列で行列除算を行っている。一般には係数行列の逆行列を右からかけると説明される。

$$\frac{\begin{array}{cccc} 2 & 1 & 1 & 15 \\ 4 & 2 & 5 & 39 \\ 8 & 8 & 0 & 83 \end{array}}{\begin{array}{ccc} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 5 \\ 8 & 8 & 9 \end{array}}$$

3. 手計算

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 15 \\ 4 & 2 & 5 & 39 \\ 8 & 8 & 9 & 83 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 15 & \\ 0 & 0 & 3 & 9 & (2-1\times 2) \\ 0 & 4 & 5 & 23 & (3-1\times 4) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 15 & \\ 0 & 4 & 5 & 23 & \\ 0 & 0 & 3 & 9 & (exchange 2, 3) \end{pmatrix}$$

$$z = 3, y = 2, x = 5$$

4. /math/misc/gauss_elimination

```
   gauss_elimination K0
+--------------+-----+---+
|8  8    9   83|2 1 0|0 2|
|0 _2  0.5 _2.5|     |   |
|0  0 _1.5 _4.5|     |   |
+--------------+-----+---+
```

右の 2 つのボックスは行の交換順を現している

5. /math/misc/gauss_jordan

```
   gauss_jordan K0
1 0 0 5
0 1 0 2
0 0 1 3
```

1.2 掃き出し法が効かないマトリクス

元の張れないマトリクスは数値計算でどのような挙動をするか確認しておこう

```
   cr K1
_. _. _. _.
_. _. _. _.
_. _. _. _.
```

クラメール法はお手上げ

```
   gauss_elimination K1
+------------+-----+---+
|4 6   3   41|2 0 1|0 1|
|0 6 1.5 16.5|     |1 2|
|0 0   0    0|     |   |
+------------+-----+---+
```

$$
\begin{pmatrix}2&1&1&15\\4&6&3&41\\2&9&3&37\end{pmatrix}\rightarrow\begin{pmatrix}2&1&1&15&\\0&4&1&41&(2-1\times2)\\0&8&2&22&(3-1\times1)\end{pmatrix}\rightarrow\begin{pmatrix}2&1&1&15&\\0&4&1&11&\\0&0&0&0&(3-2\times2)\end{pmatrix}
$$

gauss_jordan 法も解けておらず左が単位行列になっていない

```
   gauss_jordan K1
1 0 0.375 6.125
0 1  0.25  2.75
0 0     0     0
```

次の行列を吐き出すと逆行列が求まり、元の係数行列は単位行列になる

```
  a=. (}:"1 K0),. =/~i.3
2 1 1 1 0 0
4 2 5 0 1 0
8 8 9 0 0 1
```

```
   gauss_elimination a
+--------------------+-----+---+
|8  8    9 0    0    1|2 1 0|0 2|
|0 _2  0.5 0    1 _0.5|     |   |
|0  0 _1.5 1 _0.5    0|     |   |
+--------------------+-----+---+
```

2　各種の分解

2.1　QR 分解とシュミットの直交化

J の Foreign(!: 外部接続詞) にシュミットの直交化が仮置きされたままになっているが便利な機能だ。

```
]'q r'=. 128 !:0  }:"1 K0
+-----------------------------+----------------------+
|0.218218 _0.39036    _0.894427|9.16515 8.07406 10.2562|
|0.436436 _0.78072     0.447214|      0  1.9518 0.09759|
|0.872872  0.48795 _8.27511e_17|      0       0 1.34164|
+-----------------------------+----------------------+
```

（シュミットの直交化）

```
   q +/ . * r
2 1 1
4 2 5
8 8 9
```

QR 分解から固有値を求める

```
   rh }:"1 K0
13.746 _1.74597 1
```

2.2 LU 分解

1. Script の所在
   /math/misc/matfacto
   choreski,lud,qrd (qrd は単に 128!:0 を使用)
2. 仕組み
   LU 分解は下三角行列 (L) と上三角行列 (U) に分解

$$Ax = b \to A = LU \to LUx = b \to Ly = b \to Ux = y$$

3. Script の実行

```
   lud }:"1 K0
+----------+---------+-----+
|   1   0 0|8  8    9|0 0 1|
| 0.5   1 0|0 _2  0.5|0 1 0|
|0.25 0.5 1|0  0 _1.5|1 0 0|
+----------+---------+-----+
```

4. LU 分解による方程式の解法（Script 外）
   - L と U
     ```
        ]'l0 u0'    =.  }: lud }:"1 K0
     +----------+---------+
     |   1   0 0|8  8    9|
     | 0.5   1 0|0 _2  0.5|
     |0.25 0.5 1|0  0 _1.5|
     +----------+---------+
     ```
     $Ax = b$ の b を LU 分解の右の表を見ながら変更
     ```
        b=. 83 39 15
     ```
   - ```
       (b %. l0) %. u0
     5 2 3
     ```

5. 佐藤・中村の数値例

```
   SN0
2 14  2 12  8
```
```

```
3 23  7 24 10
4 31 17 47 20
4 29  8 32 19
```

```
 '10 u0'=. }: lud }:"1 SN0
+----------------------+--------------------+-------+
|   1     1          0 0|4 31     17        47|0 0 0 1|
|   1     0          0 0|0 _2     _9       _15|0 0 1 0|
| 0.5  0.75 _0.0540541 1|0  0 _4.625    _9.375|1 0 0 0|
|0.75 0.125          1 0|0  0      0 _0.756757|0 1 0 0|
+----------------------+--------------------+-------+
```

```
  b=. 19 20 8 10  NB. order=. 3 2 0 1
19 20 8 10
```

```
   (b %. l0) %. u0
2 _1 _3 2       NB. OK
```

2.3 コレスキー分解

正定値エルミート行列 A を下三角行列 L と L の共役転置 L^t との積に分解することをいう。

$$A = LL^t$$

任意の正定行列 A に対し左下三角行列 V が存在し $A = VV^t$ と表現できる
[*1]

1. Example from MATLAB original page

```
    C1
1 0 1
0 2 0
1 0 3
```

2. 実行例

```
   ] a=. choleski C1
1       0       0
0 1.41421       0
1       0 1.41421
```

3. `   a +/ . * |: a`

[*1] JAPLA の研究会が始まったころコレスキー分解の話は聞いたが、それ以降使ったことがない。

```
1 0 1
0 2 0
1 0 3
```

4. 鉄板の K0 でエラーが出る。対称正定行列でないとはじかれる。(MATLAB 公式ページのコレスキー分解が詳しい)

```
   ] a=. choleski }:"1 K0
|domain error: choleski
|   l1=.choleski z-(t=.(+|:y)mp    %.x)mp y
```

3 行列式

行列式は関孝和とライプニッツが個別にほぼ同時に発見したと紹介している線形数学の教科書はほとんど見かけない。和算家の中には関は途中で計算を間違えていると得意気にいう人がいるが、ライプニッツの方が早い次数で間違えている。正したのは関の高弟建部賢弘。

/math/misc/det

J の行列式のプリミティブは `det=: -/ . *`

ここにガウスの掃き出し法を経由した堅牢なスクリプト (detm) が入っている

```
   -/ . * }:"1 K0
_24

   detm }:"1 K0
_24
```

JAPLA の研究会では潰れた行列はうまくいかないと教えられた

4 反復法による解法

定常反復法といわれる gauss-seidel 法と jacobi-iteration 法が入っている。Script は簡単だが収束は遅いと言われるがマシンパワーが得られる今では確実な方法も大切である

1. Script の所在
   /math/misc/linear
2. 確実な例題と入力形式

$$\begin{cases} 4x_1 & +x_2 & +x_3 & = 4 \\ 2x_1 & +6x_2 & x_3 & = -8 \\ x_1 & +2x_2 & +5x_3 & = 7 \end{cases}$$

```
   SN1
4 1 1  4
2 6 1 _8
1 2 5  7
```

```
 (}:"1 SN1);({:"1 SN1)
+-----+------+
|4 1 1|4 _8 7|
|2 6 1|      |
|1 2 5|      |
+-----+------+
```

```
  gauss_seidel (}: "1 SN1);{: "1 SN1
       1 _1.66667 1.86667
    0.95 _1.96111 1.99444
0.991667  _1.9963 2.00019
0.999028 _1.99971 2.00008
0.999907 _1.99998 2.00001
0.999993       _2       2
       1       _2       2
       1       _2       2
       1       _2       2
       1       _2       2
```

```
  jacobi_iteration (}: "1 SN1);{: "1 SN1
       1 _1.33333     1.4
0.983333     _1.9 1.73333
 1.04167    _1.95 1.96333
0.996667 _2.00778 1.97167
 1.00903 _1.99417 2.00378
0.997597 _2.00364 1.99586
 1.00194 _1.99851 2.00194
0.999143 _2.00097 1.99901
 1.00049 _1.99955 2.00056
0.999748 _2.00026 1.99972
 1.00013 _1.99987 2.00015
0.999929 _2.00007 1.99992
 1.00004 _1.99996 2.00004
 0.99998 _2.00002 1.99998
 1.00001 _1.99999 2.00001
0.999995 _2.00001 1.99999
       1       _2       2
0.999998       _2       2
       1       _2       2
       1       _2       2
```

3. もう一つの例題

中島研吾 (東京大学情報基盤センター）氏の丁寧な解説がある。

http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/13n/SolverIterative.pdf

$$\begin{cases} 3x_1 & +x_2 & -x_3 & = 0 \\ x_1 & -4x_2 & +2x_3 & = 24 \\ 2x_1 & -x_2 & +5x_3 & = 14 \end{cases}$$

- ```
     T0
  3  1 _1  0
  1 _4  2 24
  2 _1  5 14
  ```
- 反復計算
  ```

```
   gauss_seidel (}:"1 T0);({:"1 T0)
      0       _6      1.6
2.53333 _4.56667 0.873333
1.81333    _5.11  1.05267
2.05422 _4.96011 0.986289
1.98213 _5.01132  1.00488
 2.0054 _4.99621 0.998598
1.99827 _5.00113  1.00047
2.00053 _4.99963  0.99986
1.99983 _5.00011  1.00005
2.00005 _4.99996 0.999986
1.99998 _5.00001        1
2.00001       _5 0.999999
      2       _5        1
      2       _5        1
      2       _5        1
      2       _5        1
      2       _5        1
      2       _5        1
      2       _5        1
```

```
   jacobi_iteration (}:"1 T0);({:"1 T0)
      0       _6      2.8
2.93333     _4.6      1.6
2.06667 _4.46667 0.706667
1.72444    _5.13     1.08
   2.07 _5.02889  1.08422
 2.0377 _4.94039 0.966222
1.96887 _5.00746 0.996841
2.00143 _5.00936  1.01096
2.00677 _4.99416 0.997554
1.99724 _4.99953 0.998458
1.99933 _5.00146   1.0012
2.00089 _4.99957 0.999976
1.99985 _4.99979 0.999732
1.99984 _5.00017   1.0001
2.00009 _4.99999  1.00003
2.00001 _4.99996 0.999966
1.99998 _5.00002  1.00001
2.00001       _5  1.00001
      2       _5 0.999997
      2       _5        1
```

- メカニズム

  中島に実例の紹介があった。何をやっているかは数式よりよくわかる。

  gauss-seidel 法の方が最新の更新を利用しているので概ね 2 倍収束が早く Script も簡単である。

  jacobi 法は並列演算が可能。

$$
\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= \frac{1}{3}(-x_2^k + x_3^k) \\
x_2^{k+1} &= \frac{1}{4}(24 - x_1^{k+1} - 2x_3^k) \\
x_3^{k+1} &= \frac{1}{5}(14 - 2x_1^{k+1} + x_2^{k+1})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= \frac{1}{3}(-x_2^k + x_3^k) \\
x_2^{k+1} &= \frac{1}{4}(24 - x_1^k - 2x_3^k) \\
x_3^{k+1} &= \frac{1}{5}(14 - 2x_1^k + x_2^k)
\end{aligned}
$$

4. 収束
   - 対角優位

     第 i 行の対角項以外の成分の絶対値の和よりも対角項の絶対値が大きい場合
   - 正定置で対称
5. Philipp Ludwig von Seidel(1821-1896, ドイツ) ベルリン大学で Dirichlet,Enche, などに、ケニッヒ大学で Bessel,Jacobi,Neuman に学ぶ。Jacobi にミュンヘン行を薦められ其処で博士をとり、のちにミュンヘン大学教授、光学、天文学者

   光学のザイデル収差で知られる。1874 gauss-seidel 法

5　SVD 法

5.1　SVD 法

math/misc/svd

任意の m × n の実数行列 $A(rank = k)$ があるときに、次元 $m \times m$ の直交行列 V と、次元 $n \times n$ の直交行列 U、そして非対角成分がゼロで対角成分 λi が、$\lambda i\ 0(i <= k), \lambda i = 0(i > k)$ となる行列 S が存在し（この非ゼロの対角成分を 特異値とよぶ）

$A = S \sum V$ と変形できる。

```
  svd D2
 2  2  2  2
 1 _1  1 _1
_1  1 _1  1
```

```
   svd D2
+--------------------+-----------+-------------+
|1         0        0|4 2.82843 0|0.5  0.5 _0.5|
|0  0.707107 0.707107|           |0.5 _0.5  0.5|
|0 _0.707107 0.707107|           |0.5  0.5 _0.5|
|                    |           |0.5 _0.5  0.5|
+--------------------+-----------+-------------+
  左特異ベクトル          特異値      右特異ベクトル
```

- AA^t の 0 でない固有値の正の平方根は A の特異値
  $A = S \sum V$ のとき、$AA^t = V \sum^t \sum V$
- 行列の固有値分解は正方行列に対してのみ定義できるが，特異値分解は縦長、横長の長方行列でも考えることができる。
- 対称行列は直交行列で対角化できる。A が対称行列のとき，A の固有値と特異値は一致する。
- 行列の特異値の二乗和はその行列の全成分の二乗和と等しい。この値の平方根を行列のフロベニウスノルムという。

6　LAPACK2

J9 で LAPACK が全面改定となり、LAPACK2 となっている。

references

薩摩順吉 · 四谷昌ニ「キーポイント線形代数」岩波書店 1992

佐藤次男 · 中村理一郎「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社　2001