計算情報学 I

名古屋大学　情報文化学部
自然情報学科３年
第５回

鈴木泰博
情報文化学部・大学院情報科学研究科
複雑系科学専攻

Science of interactions

Agenda

計算情報学Ｉ　第５回

１．前回の復習（ガウスの消去法）
２．ＬＵ分解
３．ＬＵ分解とジョルダン法
４．ＬＵ分解の計算量
５．チェックテスト（第１回）の説明

Science of interactions

ガウスの消去法
～線形代数の復習

素直に順番にただ未知数を消去し、与えられた問題を簡単な形に書き換えて解く

$$
\begin{aligned}
\square + \square + \square &= \square \\
\square + \square + \square &= \square \\
\square + \square + \square &= \square
\end{aligned}
$$

①"下の式"から"上の式"の何倍かを引き、左から順に未知数を消してゆく。（前進消去）

$$
\begin{aligned}
\square + \square + \square &= \square \\
\square + \square &= \square \\
\square + \square &= \square
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\square + \square + \square &= \square \\
\square + \square &= \square \\
\square &= \square
\end{aligned}
$$

②求まった未知数を下の式から代入し順番に未知数を求めていく。（後退代入）

Science of interactions

ガウスの消去法のアルゴリズム
前進消去

"下の式" から "上の式" の**何倍**かをひく

$\dfrac{a_{21}}{a_{11}}$ 4÷2=2倍

$$
\begin{aligned}
\boxed{2x} &+ y + z = 15 \cdots ① \\
\boxed{4x} &+ 6y + 3z = 41 \cdots ② \\
8x &+ 8y + 9z = 83 \cdots ③
\end{aligned}
$$

$\dfrac{a_{31}}{a_{11}}$ 8÷2=4倍

$$
\begin{aligned}
\boxed{2x} &+ y + z = 15 \cdots ① \\
4x &+ 6y + 3z = 41 \cdots ② \\
\boxed{8x} &+ 8y + 9z = 83 \cdots ③
\end{aligned}
$$

第１行の $\dfrac{a_{i1}}{a_{11}}, i = 2,3,\ldots n$ を第 i 行から引く。

Science of interactions

ガウスの消去法のアルゴリズム
前進消去

第 *k* 行 (*k*=1,2,…n)の $\frac{a_{ik}}{a_{kk}}, i = 2,3,\ldots n$ 倍を第 *i* 行から引く

$$
\begin{array}{ccccccccc}
2x & + & y & + & z & = & 15 & \cdots & ① \\
 & & 4y & + & z & = & 11 & \cdots & ② \\
 & & 4y & + & 5z & = & 23 & \cdots & ③
\end{array}
$$

第2行の $\frac{a_{32}}{a_{22}}$ 倍を第3行から引く

→第1列からk列までは既に0

またk列も、$a_{ik} - (\frac{a_{ik}}{a_{kk}}) \times a_{kk} = 0$

アルゴリズム

for k=k+1 to N

引き算

を繰り返す

$$y_i - (\frac{a_{ik}}{a_{kk}}) \times y_k = y_i$$

ガウスの消去法のアルゴリズム
前進消去

k =1,2,…,N の順に

i = k+1,k+2, … N の順に

$$p := \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$$

j = k+1, k+2, … N の順に

$$a_{ij} := a_{ij} - \frac{a_{ik}}{a_{kk}} \times a_{kj}$$

を繰り返す

$$y_i - \left(\frac{a_{ik}}{a_{kk}}\right) \times y_k = y_i$$

を繰り返す

を繰り返す

Science of interactions

ガウスの消去法のアルゴリズム
後退代入

前進消去完了後

$$
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1N}x_N & = & y_1 \\
 & & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2N}x_N & = & y_2 \\
 & & & & \cdots & & & & \\
 & & & & a_{N-1N-1}x_{N-1} & + & a_{N-1N}x_N & = & y_{N-1} \\
 & & & & & & a_{NN}x_N & = & y_N
\end{array}
$$

$$x_{N-1} = (y_{N-1} - a_{N-1N}x_N)/a_{N-1N-1}$$

$$x_N = \frac{y_N}{a_{NN}}$$

$$\boxed{x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{N} a_{ik}x_k)/a_{ii}}$$

Science of interactions

ガウスの消去法のアルゴリズム
後退代入

$$
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1N}x_N & = & y_1 \\
 & & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2N}x_N & = & y_2 \\
 & & & & \cdots & & & & \\
 & & & & a_{N-1N-1}x_{N-1} & + & a_{N-1N}x_N & = & y_{N-1} \\
 & & & & & & \boxed{a_{NN}x_N} & \boxed{=} & \boxed{y_N}
\end{array}
$$

アルゴリズム

$$x_N := \frac{y_N}{a_{NN}}$$

i = N-1, N-2, …, 1の順に

$$x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{N} a_{ik}x_k) / a_{ii}$$

を繰り返す

ガウスの消去法のアルゴリズム
計算量

これを
n-k回
繰り返す

k =1,2,…,N-1 の順に

i = k+1,k+2, … N の順に

$$p := \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$$ （割り算１回）

j = k+1, k+2, … N の順に

$$a_{ij} := a_{ij} - p \times a_{kj}$$ （掛け算(N-k)回）

を繰り返す

$$y_i - p \times y_k = y_i$$ （掛け算１回）

を繰り返す

を繰り返す

$$\boxed{\sum_{k=1}^{n-1} (n-k+2)(n-k)}$$

Science of interactions

前進消去の計算量（つづき）

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2)$$

$$=\sum_{k=1}^{n-1} l(l+2)$$

$$=\sum_{k=1}^{n-1}(l^2+2l)=\sum_{k=1}^{n-1} l^2+2\sum_{k=1}^{n-1} l$$

$$=\sum_{k=1}^{n-1} l^2+2\sum_{k=1}^{n-1} l=\frac{n(n-1)(2n-1)}{6}+n(n-1)$$

$$=\sum_{k=1}^{n-1}\frac{n(n-1)(2n-1)}{6}+n(n-1)=\boxed{\frac{n(n-1)(2n+5)}{6}}$$

後退代入
計算量

アルゴリズム

$$x_N := \frac{y_N}{a_{NN}}$$ （割り算１回）

i = N-1, N-2, …, 1の順に

$$x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{N} a_{ik} x_k) / a_{ii}$$

（掛け算 $\frac{n(n-1)}{2}$ 回）

（割り算 **N-1**回）

を繰り返す

$$\frac{n(n-1)}{2} + n = \boxed{\frac{n(n+1)}{2}}$$

（掛け算回）

Science of interactions

ガウスの消去法の計算量

$$\frac{n(n-1)(2n+5)}{6}+\frac{n(n+1)}{2}=\frac{n(n^2+3n-1)}{3}\cong\boxed{O(n^3)}$$

Science of interactions

Ｌｕ分解

ＬＵ分解

数値計算を行なう問題によっては同一係数の連立一次方程式を何度も解く必要がある場合がある。

$$
\begin{pmatrix}
A & B & & & \\
B & A & B & & \\
 & B & A & B & \\
 & & B & A & B \\
 & & & B & A
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ U_3^{n+1} \\ U_4^{n+1} \\ U_5^{n+1}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
U_1^{n} \\ U_2^{n} \\ U_3^{n} \\ U_4^{n} \\ U_5^{n}
\end{pmatrix}
$$

(例）偏微分方程式の差分解法（陰公式）

$U_1,\ldots,U_5$ を求めていくために同一係数の連立一次方程式を何度も解く必要がある。そうした問題に対してはＬＵ分解が有効である。

LU分解とは

LU分解とは係数行列Ａを下三角行列L(Lower triangular matrix)と上三角行列U(Upper triangular matrix)の積に分解することをさす

Ａ＝ＬＵ

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

下三角行列

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix}$$

上三角行列

ＬＵ分解を用いた連立一次方程式の解法

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
x_1 & + & x_2 & & & + & 3x_4 & = & y_1 \\
x_1 & + & x_2 & - & x_3 & + & x_4 & = & y_2 \\
3x_1 & - & x_2 & - & x_3 & + & 2x_4 & = & y_3 \\
-x_1 & + & 2x_2 & + & 3x_3 & - & x_4 & = & y_4
\end{array}
$$

$$\Downarrow$$

$$
Ax = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 3 & -1 \end{pmatrix}
= \boxed{\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\text{L}}
\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix}}_{\text{U}}}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix}
$$

ＬＵ分解を用いた連立一次方程式の解法

$$
\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ \\ \\ x_4 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix}
$$

Uxをyとおく

Ｌ　　　　y

$\boxed{\text{Ｌｙ＝(4,1,-3,4)}}$

前進代入

y_1 … y_4

$$y_1 = 4$$

$$2y_1 + y_2 = 1 \qquad 2\cdot 4 + y_2 = 1 \qquad y_2 = -7$$

$$3y_1 + 4y_2 + y_3 = -3 \qquad 3\cdot 4 + 4\cdot -7 + y_3 = -3 \qquad y_3 = 13$$

$$-y_1 - 3y_2 + y_4 = 4 \qquad -4 - 3\cdot -7 + y_4 = 4 \qquad y_4 = -13$$

$\boxed{\text{y＝（4，－7，１３，－１３）}}$

ＬＵ分解を用いた連立一次方程式の解法

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

ｙ＝（４,－７,１３,－１３）

Ｕｘ＝ｙ
後退代入

$$x_1 \qquad x_1 + x_2 + 3x_4 = 4 \qquad x_1 + 2 + 3\cdot 1 = 4 \qquad x_1 = -1$$

$$x_2 + x_3 + 5x_4 = 7 \qquad x_2 + 0 + 5\cdot 1 = 7 \qquad x_2 = 2$$

$$3x_3 + 13x_4 = 13 \qquad 3\cdot x_3 + 13\cdot 1 = 13 \qquad x_3 = 0$$

$$x_4 \qquad -13x_4 = -13 \qquad x_4 = 1$$

Ｘ＝（-1, 2, 0, 1)

LU分解した行列を用いた連立一次方程式の計算量

ＬＵ分解をした係数行列を用いて連立一次方程式を解く場合の計算量を考える

(i=N-1,N-2,…1)

前進代入と後退代入 $x_i = (y_i - \sum_{k=i+1}^{N} a_{ik} x_k) / a_{ii}$ しかしないので、

$$1 + 2 + \ldots n = \frac{n(n+1)}{2} \times 2 = n(n+1) \approx O(n^2)$$

ガウスの消去法の計算量が $O(n^3/3)$ なのでＬＵ分解の方が効率が良い。

Science of interactions

ＬＵ分解

LU分解をするためには
ガウスの消去法を行う。

$$
\begin{pmatrix}
\boxed{1} & 1 & 0 & 3 \\
2 & 1 & -1 & 1 \\
3 & -1 & -1 & 2 \\
-1 & 2 & 3 & -1
\end{pmatrix}
$$

掃きだし

２行目の要素－１行目の要素ｘ２
３行目の要素－１行目の要素ｘ３
４行目の要素－１行目の要素ｘ－１

$$
\begin{pmatrix}
1 & 1 & 0 & 3 \\
0 & 1 & -1 & 1 \\
0 & -1 & -1 & 2 \\
0 & 2 & 3 & -1
\end{pmatrix}
$$

$$
L^{(1)} =
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 \\
2 & 1 & 0 & 0 \\
3 & 0 & 1 & 0 \\
-1 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
$$

ＬＵ分解

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & \boxed{-1} & -1 & -5 \\ 0 & -4 & -1 & -7 \\ 0 & 3 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

掃きだし

３行目の要素－２行目の要素ｘ４
４行目の要素－２行目の要素ｘ－３

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix}$$

$$L^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ＬＵ分解

$$L^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad L^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix}$$

Science of interactions

演習
ＬＵ分解

以下の係数行列をＬＵ分解せよ。

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 6 & 1 & -2 \\ -3 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

解答

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix}$$

$$\updownarrow$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 6 & -2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix}$$

解答

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 6 & 1 & -2 \\ -3 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Science of interactions

ＬＵ分解とは何か？

ＬＵ分解の計算とはガウスの消去法における前進消去

ガウスの消去法で前進消去を行なう場合に係数行列と定数yの部分は同時に計算する必要はなく、係数行列のみ先に前進消去しておくことができる
それが、ＬＵ分解に他ならない

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix}$$

L　　　U

掃きだしの
オペレーション

前進消去

$$L^{(k)} L^{(k-1)} \ldots L^{(1)}$$

ＬＵ分解とは何か？

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

Aに対する前進消去は、Aの左から順に$L^{(1)}, L^{(2)}, L^{(3)}$ を掛けたことになる。

$$L^{(1)}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad L^{(2)}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad L^{(3)}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

ＬＵ分解とは何か？

$$L^{(1)}A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \longrightarrow L^{(2)}L^{(1)}A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 6 & -2 \end{pmatrix} \longrightarrow L^{(3)}L^{(2)}L^{(1)}A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix}$$

ここで、$\lambda = L^{(3)}L^{(2)}L^{(1)}$ とすると、λＡ＝Ｕ

$$\lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -5 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

$A = \lambda^{-1}U$ より、$\lambda^{-1} = L$ とすると、

$$L = \lambda^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 1 \end{pmatrix}$$

チェックテスト（第１回）の説明

- 配点20点（満点）
- 時間60分
- 持ち込み不可・再試験はなし
- 欠席の場合は零点と評価し最終試験の際に調整（次のスライドで詳説）
- 出題範囲は以下の通り；
    - 誤差論
    - 計算量理論
    - 連立一次方程式（ガウスの消去法）
    - 連立一次方程式（ＬＵ分解）
    - ガウスの消去法、ＬＵ分解の計算量

チェックテスト
欠席の場合の扱いについて

欠席の場合は零点と評価

欠席の場合の補正

n(=1,2,3)回数欠席の場合は最終試験を

$40+n\times 20,(n=1,2,3)$ 満点に補正

補正式

$$\frac{m}{40}\times(40+n\times 20)$$

４０点満点での得点をm、欠席数をｎとする。
有効数字は３桁
端数は四捨五入するものとする。

Science of interactions

フィードバック制度

例）チェックテストの結果が10点であった。
自分は誤差論と計算量理論での評点が低かった

⇒自分でその部分を再度復習する。
⇒復習の結果をレポートにして提出
⇒レポート点をチェックテストの得点に
　加算する（最大合計で20点満点まで）

この例の場合、もしレポート点が10点であれば、チェックテストの評点は20点満点になる。

フィードバックレポートの評価基準

体裁　文字や図表が明瞭かつ明確である。
⇒判読が困難な手書きの殴り書き数枚のようなレポートは内容はともかく評価は低い。

内容　自分の学習したポイントが明確か。
自らの言葉で書かれているか？
（例）自分で問題を作り、それを解説する。
⇒教科書やテキストの丸写しのようなものは評価が低い。