4J 数値解析 補足資料 2018.10.24

ガウスの消去法

1 例題

$$\begin{cases} \epsilon x_1 & + & x_2 & = & a \\ x_1 & + & x_2 & = & 1 \end{cases}$$

ただし，

$$1 > a \gg \epsilon > 0$$

2 代数的な解析

まず，ガウスの消去法を代数的に実行してみよう．

係数行列 A		定数ベクトル $\boldsymbol{b}$
ϵ	1	a
1	1	1
（前進消去過程）		
ϵ	1	a
0	$1-1/\epsilon$	$1-a/\epsilon$
（後退代入過程）		
ϵ	0	$a-\dfrac{1-a/\epsilon}{1-1/\epsilon}$
0	$1-1/\epsilon$	$1-a/\epsilon$
1	0	$\left(a-\dfrac{1-a/\epsilon}{1-1/\epsilon}\right)\dfrac{1}{\epsilon}$
0	1	$\dfrac{1-a/\epsilon}{1-1/\epsilon}$
単位行列 E		解ベクトル $\boldsymbol{x}$

この結果より，厳密解および高精度近似解が求められる．

$$\begin{cases} x_1 & = & \left(a-\dfrac{1-a/\epsilon}{1-1/\epsilon}\right)\dfrac{1}{\epsilon} = \dfrac{a-1}{\epsilon-1} & \approx & 1-a \\ x_2 & = & \dfrac{1-a/\epsilon}{1-1/\epsilon} = \dfrac{\epsilon-a}{\epsilon-1} & \approx & a \end{cases}$$

3 数値的な解析

次に，ガウスの消去法を数値的に実行しよう．この場合，前節の前進消去過程において，第2行に情報落ち $1-1/\epsilon \approx 1/\epsilon$ および $1-a/\epsilon \approx a/\epsilon$ が発生し得る．

（前進消去過程）		
ϵ	1	a
0	$1-1/\epsilon \approx 1/\epsilon$	$1-a/\epsilon \approx a/\epsilon$
（後退代入過程）		
ϵ	0	0
0	$1/\epsilon$	a/ϵ
1	0	0
0	1	a

あるいは，前節の後退代入過程において，第1行に桁落ち $a-\dfrac{1-a/\epsilon}{1-1/\epsilon} \approx 0$ も発生し得る．

どちらにせよ，解析結果は

$$\begin{cases} x_1 & \approx & 0 \\ x_2 & \approx & a \end{cases}$$

となり，x_1 の精度が悪化してしまった．

4 ピボット選択

ガウスの消去法では，第 k 行を基準として，第 $i (i \neq k)$ 行に対して行基本変形

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{kj} \times a_{ik} \div a_{kk}$$

を反復的に適用し，係数行列 A の非対角要素 $a_{ij} (i \neq j)$ をゼロに変更して行く．

この過程で，もしピボット a_{kk} がゼロとなった場合には，それ以降の計算を続行できなくなってしまう．また，a_{kk} が微小値となった場合には，前節の通り，数値計算による誤差が増大してしまう．

これらの不都合を回避するためには，a_{kk} の絶対値ができるだけ大きくなるように，行同士を交換すると良い．行の順序，すなわち各方程式の順序を変えても，数学的にはまったく同じ連立方程式のままである．

では，誤差を抑制するために連立方程式の第1式と第2式とを交換し，再度，数値的に解析してみよう．

（ピボット交換）		
1	1	1
ϵ	1	a
（前進消去過程）		
1	1	1
0	$1-\epsilon \approx 1$	$a-\epsilon \approx a$
（後退代入過程）		
1	0	$1-a$
0	1	a

（この例では，前進消去の前処理として1度だけしかピボットを交換していない．しかし，一般に3元以上の連立方程式では，前進消去過程の内部で反復的にピボットを交換することになる.）

解析結果は

$$\begin{cases} x_1 & \approx & 1-a \\ x_2 & \approx & a \end{cases}$$

となり，高精度な近似解が得られた.（ただし，どんな問題でも高精度化できるわけではない.）