数値解析法講座 3
基礎編
行列と連立一次方程式

大地羊三*

1. 行列の定義とその四則演算

(1) 行列の定義

行列は縦と横にならべられた数の集りである。縦と横の大きさが，同じでなくてもさしつかえない。行列の中に含まれる一つ一つの数を，要素と呼ぶことにする。これは，実数でも複素数でもかまわない。また，要素そのものが一つの小さな行列（小行列）になっていることもある。それぞれの要素の位置は，2個のサフィックスで区別し，a_{ij} などと書く。前のサフィックスは，上から数えて何行目にあるかを示し，後のサフィックスは，左から数えて何列目にあるかを示す。したがって，a_{ij} は i 行と j 列の交点にある要素を示す。要素の位置だけが問題なときは，(i,j) 要素または要素 (i,j) などと書くことにする。

行列は太文字で $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{a}$ などと書く。行と列の大きさが問題なときは，たとえば，(m,n) 行列などと呼ぶことにする。したがって，(3,4) 行列 $\boldsymbol{A}$ は次のような形をしている。

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

とくに，1行だけからできている行列のことを行マトリックス（または行ベクトル）と呼んでいる。このときは前のサフィックスは同じなので，これを省略して

$$\boldsymbol{B}=[b_1\ b_2\ b_3 \cdots b_n]$$

などと書く。同じように1列だけでできている行列を，列マトリックス（または列ベクトル）と呼び，後のサフィックスを省略して

$$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \quad \text{または} \quad \boldsymbol{X}=[x_1\ x_2 \cdots x_m]^T$$

と書くことにする。左側のように書くほうが望ましいが行数を多く必要とするので，右側のような書き方を採用することもある。肩につけた T は，行と列を入れかえる操作（転置；本節の **(2) d)** 参照）を意味している。

ここで，行列と行列式の差について説明しておこう。日本語ではよく似た発音であるが，英語では前者をマトリックス（matrix），後者をデターミナント（determinant）といった具合に，全く異なった呼びかたをしている。さきに述べたように，行列は縦，横にならべられた数の集りであるが，行列式は，このようにしてならべられた数の間で，ある定められた法則に従った演算の結果として得られる一つの数である。たとえば，

$$\text{行列}\begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}\text{といえば}$$

4,3,2,1 を要素にする数の集りであるが行列式 $\begin{Vmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 1 \end{Vmatrix}$ といえば，$4\cdot1-3\cdot2=-2$ という数のことである。

(2) 行列の四則演算

行列が数の集りであることはさきに述べた。このままでは，たいして役に立つものにはならない。行列を数と同じように取扱うためには，2つの行列の間で四則演算（加え算・引き算・掛け算・割り算）を定義する必要がある。定義の仕方はいろいろ考えられるが，われわれとしては，連立一次方程式を取扱ううえで便利なように定義することが望ましい。

a) 行列の加減算

2つの行列 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の同じ位置にある要素が等しいとき，$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ は等しい。すなわち

$$a_{ij}=b_{ij} \text{ なるとき } \boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$$

ただし，a_{ij}, b_{ij} は，それぞれ行列 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の (i,j) 要素である。

2つの行列 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の加え算は，同じ位置にある要素どうしを加えたものであり，引き算は同じ位置にある要素どうしを引いたものであると定義する。すなわち

$$a_{ij} \pm b_{ij}=c_{ij} \text{ なるとき } \boldsymbol{A} \pm \boldsymbol{B}=\boldsymbol{C}$$

この定義からもわかるように，2つの行列 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ の行数および列数が等しくないと加減算ができない。なお加減算の単位（それに加えても，加えた結果の内容が変わらない行列）は，零行列（すべての要素が0になっている行列）である。

b) 行列の掛け算

2つの行列 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ を掛けた結果できる行列を $\boldsymbol{C}$ とすると，$\boldsymbol{C}$ の (i,j) 要素は，掛け算の左側にある行列 $\boldsymbol{A}$ の i 行目にある行ベクトルと，右側にある行列 $\boldsymbol{B}$ の j 列目にある列ベクトルの，内積になっているものとする。すなわち

$$C_{ij}=\sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj} \text{ なるとき } \boldsymbol{C}=\boldsymbol{AB}$$

この定義からもわかるように，掛けられる行列 $\boldsymbol{A}$ の列

* 正会員　工博　法政大学教授　工学部土木工学科

の数と，掛ける行列 $\boldsymbol{B}$ の行の数が等しくないと，行列の掛け算は実行できない。また，行列の掛け算では，順序を入れかえると，計算不能になるか，計算できても異なった結果が得られるから，注意しなければならない。たとえば

$$\begin{bmatrix}4&2\\1&3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5&3\\2&6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}24&24\\11&21\end{bmatrix},\ \begin{bmatrix}5&3\\2&6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4&2\\1&3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}23&19\\14&22\end{bmatrix}$$

実は，行列の演算と普通の数の演算との間で一番異なっている点が，掛け算の順序の問題である。この点にさえ気をつければ，行列の演算は，普通の数の演算と同じ感覚で実行できる。むろん，順序を変えても結果が変わらない行列もある。たとえば

$$\begin{bmatrix}4&2\\1&3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b&0\\0&b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4b&2b\\1b&3b\end{bmatrix},\ \begin{bmatrix}b&0\\0&b\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4&2\\1&3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4b&2b\\1b&3b\end{bmatrix}$$

このように，対角線に同じ数が並んだ行列（スカラー行列）は，普通の数と全く同じ働きをし，掛け算の相手になる行列の要素を b 倍している。この演算は

$$\begin{bmatrix}4&2\\1&3\end{bmatrix}b \text{ または } b\begin{bmatrix}4&2\\1&3\end{bmatrix}$$

などと書くことが許されている。とくに，$b=1$ とすると掛け算の結果は，相手の行列に何の影響も与えない。すなわち，行列の掛け算の単位は，対角線に１を並べた行列である。これを単位行列と呼んでいるが，普通の数の掛け算の１に相当する働きを持っている。

c） 行列の割り算（逆行列）

行列の割り算は，掛け算の逆演算であると定義する。普通の数の場合にも，このような定義が可能である。ある数 a に掛けて１になる数，すなわち $ax=1$ となる数 x を a の逆数と呼び，a^{-1} と書く。そして割り算は，逆数を掛けることであると定義している。同じように，ある行列 $\boldsymbol{A}$ に掛けて単位行列（$\boldsymbol{E}$ と書く）になる行列，すなわち $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{E}$ となる行列 $\boldsymbol{X}$ のことを逆行列と呼び，$\boldsymbol{A}^{-1}$ と書く。そして，行列の割り算は，逆行列を掛けることであると考える。簡単のために，$\boldsymbol{A}$ を (2,2) 行列とすると，$\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{E}$ すなわち

$$\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_{11}&x_{12}\\x_{21}&x_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}$$

は，左辺の掛け算を実行すると，次の２組の連立一次方程式と同等であることがわかる。

$$a_{11}x_{11}+a_{12}x_{21}=1 \qquad a_{21}x_{11}+a_{22}x_{21}=0$$
$$a_{11}x_{12}+a_{12}x_{22}=0 \qquad a_{21}x_{12}+a_{22}x_{22}=1$$

一般に，(n, n) 行列の逆行列を求めることは，n 組の n 元連立一次方程式を解くことと同じである。この説明からもわかるように，$\boldsymbol{A}$ の行の数と列の数が同じでないと，方程式の数と未知数の数がそろわないため，$\boldsymbol{X}$ を求めることができない。また，$\boldsymbol{A}$ の行と列の数が同じであっても，$\boldsymbol{A}$ の行列式（デターミナント）が０のときは解が存在しない。行と列の数が同じ行列のことを，正方行列と呼んでいる。この定義を用いると，$\boldsymbol{A}$ が正方行列で，そのデターミナントが０でないときに限って逆行列が存在するということになる。逆行列を持つ行列のことを，正則行列と呼んでいる。逆行列を持たない正方行列は，普通の数の割り算における０と同じ効果を持つものと考えてさしつかえない。しかも，すべての要素が０になっている行列（零行列）以外にも，逆行列を持たない正方行列があるから注意しなければならない。逆行列を求める方法は，**2．**で説明する。

最後に，２つ以上の正方行列の積の逆行列は，それぞれの逆行列の順序を変えた積，すなわち

$$(\boldsymbol{AB})^{-1}=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1},\ (\boldsymbol{ABCD})^{-1}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}$$

になることを注意しておく。

d） 行列の転置

これは，普通の数にはなかった演算である。行列 $\boldsymbol{A}$ の転置行列とは，$\boldsymbol{A}$ の行と列を入れかえた行列，いいかえると $\boldsymbol{A}$ の対角線を軸にして裏返した行列のことである。たとえば $\begin{bmatrix}1&2&3\\4&5&6\end{bmatrix}$ の転置行列は $\begin{bmatrix}1&4\\2&5\\3&6\end{bmatrix}$

今後，$\boldsymbol{A}$ の転置行列のことを肩に T をつけて $\boldsymbol{A}^T$ と書くことにする。なお，2つ以上の行列の積の転置行列は，それぞれの転置行列の順序を変えた積になるが，これは逆行列の場合とよく似た性質であり，式で書くと次のようになる。

$$(\boldsymbol{AB})^T=\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A}^T,\ (\boldsymbol{ABC})^T=\boldsymbol{C}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A}^T$$

（3） 特殊な行列

前項までに，いくつかの行列を定義してきた。本項では，これらを整理し，さらにわれわれが知っていると便利な二，三の特殊な行列について説明する。行と列の数が異なる一般の行列を矩形行列と呼んでいる。これに対して，行と列の数が等しい行列は，正方行列という。矩形行列の特別な場合として，行または列の数が１個の行列があり，それぞれ行ベクトル（行マトリックス）または列ベクトル（列マトリックス）と呼んでいる。しかし，これらも行列の一種であることに変わりがないから特別扱いする必要はない。

正方行列の特別な場合として，対角線を軸にし，その両側で対称な位置にある要素が等しい行列を，対称行列と呼んでいる。また逆に，対角線上の要素が０であり，その両側で対称な位置にある要素の絶対値が等しく，符号が逆な行列も考えられる。これを逆対称行列（または交代行列）と呼んでいる。また，対角線とその下側の要素が 0 でなく，上側の要素が 0 になっている下三角行列，逆に，対角線とその上側の要素が０でなく，下側の要素が０になっている上三角行列もよく使われる。

$$\begin{bmatrix}3&2&1\\2&4&5\\1&5&6\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}0&2&1\\-2&0&5\\-1&-5&0\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}6&0&0\\3&5&0\\1&2&4\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}4&3&1\\0&5&2\\0&0&6\end{bmatrix}$$

対称行列　逆対称行列　下三角行列　上三角行列

さらに，対角線とその左右の要素だけが0でない行列を三角行列，対角線の要素だけが0でない行列を対角行列と呼んでいる。対角行列のなかで，すべての対角要素が等しい行列がスカラー行列，とくにすべての対角要素が1になっている行列が単位行列である。

$$\begin{bmatrix}4&1&0\\1&4&1\\0&1&4\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}3&0&0\\0&4&0\\0&0&5\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}4&0&0\\0&4&0\\0&0&4\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}$$

三連行列　対角行列　スカラー行列　単位行列

以上は，行列の形についての分類であったが，行列の性質で分けると，逆行列が存在する行列を正則行列，逆行列がもとの行列の転置行列になっている行列，式で書くと　$\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{A}^T$ または $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T=\boldsymbol{E}$
となる行列を直交行列と呼んでいる。また，すべての固有値（**3**. で説明する）が正になっている行列を正値行列，すべての固有値が負でない行列，いいかえるとすべての固有値が正また0はである行列を非負行列と呼んでいる。二次元のベクトルの座標変換をするときに現われる次の行列

$$\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}$$

が直交行列であることは，容易に検証できるであろう。直交行列のいま一つの例は，単位行列 $\boldsymbol{E}$ と列ベクトル $\boldsymbol{V}$ でつくった $\boldsymbol{E}-2\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^T$ である。ただし，$\boldsymbol{V}$ はその絶対値が1であるという条件（$\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V}=1$）をつけなければならない。この最後の例で用いられた行列の一般形，すなわち，$\boldsymbol{E}-a\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}^T$ の形をした行列を素行列（elementary matrix）と呼んでおり，逆行列や固有値の計算に有効な働きをしている。

$$(\boldsymbol{E}-a\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}^T)(\boldsymbol{E}-b\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}^T)=\boldsymbol{E}-(a+b-ab\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{U})\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}^T$$

であるから　$b=-a/(1-a\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{U})$　であれば，左辺の第2の素行列は，第1の素行列の逆行列になる。

2. 連立一次方程式と逆行列

(1) 直接法

次の三元連立一次方程式を例にとって説明する。

$$\left.\begin{aligned}2x_1+2x_2+2x_3&=12\\2x_1+4x_2+4x_3&=22\\2x_1+4x_2+8x_3&=34\end{aligned}\right\}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(1)$$

a) ガウス（Gauss）の消却法

式（1）の第2，第3式から x_1 を消却し，その結果として得られた第3式から x_2 を消却すると，順次

$$\begin{aligned}2x_1+2x_2+2x_3&=12 & 2x_1+2x_2+2x_3&=12\\2x_2+2x_3&=10 & 2x_2+2x_3&=10\\2x_2+6x_3&=22 & 4x_3&=12\end{aligned}$$

が得られる。このように第1式の x_1，第2式の x_2 の係数を使って，それ以下にある式から x_1, x_2 を消却することを，x_1, x_2 の係数を軸（pivot）にした掃出し（sweep out）と呼んでいる。最後の式から，$x_1\sim x_3$ を求めることは簡単である。下から順番に

$$x_3=\frac{12}{4}=3,\quad x_2=\frac{1}{2}(10-2x_3)=2,$$

$$x_1=\frac{1}{2}(12-2x_2-2x_3)=1$$

と計算を進めればよい。このように，下から順番に計算を進めることを，後退代入（backward substitution）と呼んでいる。

一般形で説明すると，n 元の連立一次方程式 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ の右辺の列ベクトルの係数 $b_1, b_2, \cdots b_n$ を $a_{1\,n+1}, a_{2\,n+1}\cdots a_{nn+1}$ と読みかえて次の行列をつくる。

$$\left[\begin{array}{cccc|c}a_{11} & a_{12} & \cdots\cdots & a_{1\,n} & a_{1\,n+1}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots\cdots & a_{2\,n} & a_{2\,n+1}\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & a_{n\,n+1}\end{array}\right]\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(2)$$

この行列の (i, i) 要素を軸にした掃出しは

$$\left\{w=\frac{a_{ki}}{a_{ii}},\ a_{kj}=a_{kj}-wa_{ij}\ (j=i+1\sim n+1)\right\}$$

$$(k=i+1\sim n)\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(3)$$

とすればよい。これを $i=1\sim n-1$ まで繰返せば，係数行列（a_{ij}）が上三角行列になる。また，後退代入は

$$a_{nn+1}=\frac{a_{nn+1}}{a_{nn}},\quad a_{in+1}=\frac{1}{a_{ii}}\left(a_{in+1}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}a_{jn+1}\right)$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(4)$$

の計算を $i=n-1\sim 1$ まで繰返せばよい。解 $x_1\sim x_n$ は，$a_{1\,n+1}\sim a_{nn+1}$ の中にできる。

以上の方法では，(i, i) 要素の下側だけを掃出しているが，上側の要素まで掃出してしまう方法が考えられる。式（1）の例で説明すると，x_1 の係数についての掃出しは前の場合と同じであるが，x_2, x_3 の係数についての掃出しは次のようになる。

$$\begin{aligned}2x_1\quad\quad\quad&=2 & 2x_1&=2\\2x_2+2x_3&=10 & 2x_2&=4\\4x_3&=12 & 4x_3&=12\end{aligned}$$

このようにすると後退代入の必要がなくなり，掃出しの操作だけで解を求めることができる。これを，ジョルダン（Jordan）の改良法，あるいは Gauss-Jordan の方法と呼んでいる。一見するとガウスの方法が改良されているように見えるが，n 元連立一次方程式について，解が求まるまでの計算回数を比較すると，ガウスの方法の場合：$n^3/3$，ジョルダンの方法の場合：$n^3/2$ となり，前者

のほうが有利である。

b) 三角化法 (trianglarization)

ガウスの消却法で，第 2，第 3 式から x_1, x_2 を消却する操作は，連立一次方程式の各式の間で行なわれた四則演算である。これを行列の形で書いてみると，式 (1) の例の場合，次のようになる。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 4 \\ 2 & 4 & 8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 12 \\ 22 \\ 34 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ 12 \end{bmatrix}$$

しかるに，行列 $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$ の逆行列は $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ であるから，

これを上式の左から掛けると

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 4 & 4 \\ 2 & 4 & 8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 12 \\ 22 \\ 34 \end{bmatrix}$$

が得られる。すなわち，式 (1) の左辺の係数行列は下三角行列と上三角行列に分解できる。これから $x_1 \sim x_3$ を求めるには，上式を次の 2 個の連立一次方程式に分解し，

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 12 \\ 22 \\ 34 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix}$$

まず，左側の式を上から順番に解いて

$$z_1=12,\ z_2=22-z_1=10,\ z_3=34-z_1-z_2=12$$

を求める。次に右側の式の右辺に $z_1 \sim z_3$ を代入し，これを $x_1 \sim x_3$ について解けばよい。この部分は，前節の後退代入と同じである。下三角行列を係数にする連立一次方程式を，上から順番に解いて $z_1, z_2, \cdots\cdots$ を求める手続きを前進代入 (forward substitution) と呼んでいる。

一般に，三角化法では，n 元の連立一次方程式 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ の係数行列を，下三角行列と上三角行列に分解して $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LR}$ とし，2 組の連立一次方程式

$$\boldsymbol{Lz}=\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{Rx}=\boldsymbol{z} \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (5)$$

を前進代入と後退代入を使って解く方法で，係数行列 $\boldsymbol{A}$ が対称行列になっているときに有効である。三角化の計算は

$$\left\{a_{ij}=a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1}\frac{1}{a_{kk}}a_{ki}a_{kj} \quad (j=i\sim n)\right\}(i=1\sim n)$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (6)$$

とすればよい。最初に係数行列の要素 a_{ij} が入っていた場所に，上三角行列の要素 r_{ij} ができる。下三角行列の要素 l_{ij} は，簡単に

$$l_{ij}=\frac{r_{ji}}{r_{jj}} \ (i \geqq j) \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (7)$$

で計算できるから，わざわざ計算して格納しておく必要はない。必要のつど式 (7) で計算すればよい。なお，式 (6) では，係数行列 $\boldsymbol{A}$ の対角線とそれより上にある要素だけが使われている。したがって，対角線を除く下半分の要素は格納する必要がない。ただし，このようにした場合は，行列 $\boldsymbol{A}$ の要素 a_{ij} の格納の方法およびインデックスのつけかたに注意が必要である。

前進代入と後退代入の計算は

$$b_i=b_i-\sum_{k=1}^{i-1}\frac{a_{ki}}{a_{kk}}b_k \quad (i=2\sim n) \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (8)$$

$$b_n=\frac{b_n}{a_{nn}},\ b_i=\frac{1}{a_{ii}}\left(b_i-\sum_{k=i+1}^{n}a_{ik}b_k\right) \ (i=n-1\sim 1)$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (9)$$

とする。$b_1 \sim b_n$ に連立一次方程式の右辺の定数項 $\boldsymbol{b}$ の要素を入れて，式 (8), (9) を実行すると，$b_1 \sim b_n$ の中に解 $x_1 \sim x_n$ が得られる。

c) デターミナントと逆行列

三角行列のデターミナントは，対角要素の積であるから，任意の正方行列のデターミナントは，それを三角化したあとで，対角要素の積をつくることによって求めることができる。三角化する方法は消却法でも三角化法（対称行列の場合に限る）でもよい。たとえば，式 (1) の係数行列のデターミナントは，$2\times2\times4=8$ である。この説明からもわかるように，デターミナントの計算量は，連立一次方程式の計算量から後退代入あるいは前進代入と後退代入の計算量を引いたものに等しい。しかるに，前進代入や後退代入の計算量は n のオーダーであるから，行列の元数が大きいときは，掃出しあるいは三角化の計算量 (n^2 のオーダ) に比べて少ないものである。したがって，デターミナントを計算するに要する時間は連立一次方程式を解くに要する時間に匹敵するものであると考えてさしつかえない。

(n, n) 行列 $\boldsymbol{A}$ の逆行列の計算は，n 個の連立一次方程式を解くことと同じである (**1**.(**2**).**c**) 参照)。すなわち，単位行列の第 1，第 2，……第 n 列ベクトルを $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots \boldsymbol{e}_n$ とすると，次の n 個の連立一次方程式

$$\boldsymbol{Ax}_1=\boldsymbol{e}_1,\ \boldsymbol{Ax}_2=\boldsymbol{e}_2, \cdots \boldsymbol{Ax}_n=\boldsymbol{e}_n \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (10)$$

の解 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots \boldsymbol{x}_n$ が，$\boldsymbol{A}$ の逆行列の第 1，第 2，……第 n 列ベクトルになる。消却法で計算する場合は，式 (2) の最後の列ベクトル $a_{1\,n+1} \sim a_{nn+1}$ に $\boldsymbol{e}_1$ を入れ，そのあとに $\boldsymbol{e}_2 \sim \boldsymbol{e}_n$ を並べて，$a_{11} \sim a_{nn}$ を軸にして掃出しを行なえばよい。この場合には，ガウスの消却法よりも，ジョルダンの改良法のほうが都合がよい。この方法を用いると，たとえば a_{ii} を軸にして掃出して行なっている場合，式 (2) の第 $1 \sim (i-1)$ 列ベクトルと第 $(n+i) \sim 2n$ 列ベクトルは，格納する必要がないほど簡単なものになる。この部分を省略してメモリーの節約をする計算法がいろいろ考案されているが，詳細については参

考文献を参照されたい。

一方，三角化法を使う場合は，行列 $\boldsymbol{A}$ を三角化したあとで，右辺の定数項ベクトル $\boldsymbol{b}$ のかわりに $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots \boldsymbol{e}_n$ を用い，前進代入と後退代入を繰返し適用すればよい。どのような計算法を使っても，逆行列を計算するためには，この程度の計算量が必要である。もし，$\boldsymbol{A}$が対称行列ならば，これを三角化したときの上三角行列 $\boldsymbol{R}$ は，$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{W}\boldsymbol{L}^T$ と分解される。ただし，$\boldsymbol{L}$ は $\boldsymbol{A}$ を三角化したときの下三角行列，$\boldsymbol{W}$ は $\boldsymbol{R}$ の対角要素だけを残し，他の要素を0にした対角行列である。したがって

$$\boldsymbol{A}^{-1}=(\boldsymbol{L}\boldsymbol{R})^{-1}=(\boldsymbol{L}\boldsymbol{W}\boldsymbol{L}^T)^{-1}=\boldsymbol{L}^{-T}\boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{L}^{-1} \cdots (11)$$

で逆行列が計算できる。ただし，$(\boldsymbol{L}^T)^{-1}$ を簡単に $\boldsymbol{L}^{-T}$ と書くことにした。$\boldsymbol{L}, \boldsymbol{W}$ の逆行列は容易に計算できる。

d） 丸めの誤差と条件の悪い行列

数値計算では，常に有限な桁数の数字を扱っている。したがって，丸めの誤差について細心の注意が必要である。連立一次方程式を直接法で解く場合には，次の計算で丸めの誤差が入り易い。

$$a_{ij}=a_{ij}-a_{ik}\frac{1}{a_{kk}}\,a_{kj}$$

とくに，a_{ik}/a_{kk} の絶対値が大きくなると丸めの誤差が入り易い。計算の方法を変えるなり，行列 $\boldsymbol{A}$ を改造するなりして，このような事態が起こらないようにしなければならない。

係数行列 $\boldsymbol{A}$ のデターミナントが小さいときは，丸めの誤差が少なくなるように細心の注意を払っても精度の良い解が得られないことがある。このような行列 $\boldsymbol{A}$ のことを，条件の悪い行列（ill conditioned matrix）と呼んでいる。掃出しなり，三角化なりを実行しているとき対角要素を見ていると，もとの行列 $\boldsymbol{A}$ が条件の悪い行列であったか否かが判定できる。たとえば，(i, i) 要素の絶対値が，$(1,1)\sim(i-1, i-1)$ 要素のそれに比べて急に小さくなっている場合は，このような事態が起こっているものと考えてさしつかえない。条件の悪い行列から得られた解 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ の精度をあげるには次のようにすればよい。すなわち，正しい解 $\boldsymbol{x}$ が，$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(1)}+\boldsymbol{y}$ であるとすると

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(1)}+\boldsymbol{y})=\boldsymbol{b} \quad \text{または} \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(1)}\equiv\boldsymbol{r}$$

であるから，$\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(1)}$ を計算して誤差 $\boldsymbol{r}$ を求め，これを右辺の定数ベクトルにして，再度連立一次方程式を解く。この解 $\boldsymbol{y}$ と前の解 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ とから $\boldsymbol{x}^{(2)}=\boldsymbol{x}^{(1)}+\boldsymbol{y}$ をつくると，$\boldsymbol{x}^{(1)}$ より精度の高い解 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ が得られる。ただし，誤差 $\boldsymbol{r}$ は精度の高い計算（たとえば倍精度）で求めなければならない。

（2） 反 復 法

次の連立一次方程式を例にとって説明する。

$$\left.\begin{aligned} 4x_1+\ x_2+\ x_3&=2\\ x_1+4x_2+\ x_3&=3\\ x_1+\ x_2+4x_3&=2 \end{aligned}\right\} \cdots\cdots(12)$$

a） ガウス・ザイデル（Gauss-Seidel）の方法

まず，式（12）を次のように書きかえる。

$$x_1=0.25\ (2\quad -x_2\ -x_3)$$
$$x_2=0.25\ (3-x_1\quad -x_3)$$
$$x_3=0.25\ (2-x_1-x_2\quad)$$

$x_1\sim x_3$ に適当な初期値（たとえば 0）を仮定して右辺に代入し，新しい $x_1\sim x_3$ を求める。これを新しい仮定値として次の $x_1\sim x_3$ を求める，といった手順を必要な精度が得られるまで繰返す方法である。この場合，第2式を計算するにあたって，第1式で求められた x_1 を使い，第3式を計算するにあたって，第1，第2式で求められた x_1, x_2 を使うようにすると，少ない繰返し回数で良い精度の解が得られる。

一般式で書くと

$$x_i^{(j+1)}=\frac{1}{a_{ii}}\left(b_i-\sum_{k=1}^{i-1}a_{ik}x_k^{(j+1)}-\sum_{k=i+1}^{n}a_{ik}x_k^{(j)}\right)$$
$$(i=1\sim n)\cdots\cdots(13)$$

ということになる。肩にカッコ書きした j は，j 番目の繰返し計算で得られたxの値であることを示す。

この方法は，誤差が自動的に補正されるので，丸めの誤差その他についてあまり気にする必要がない，という長所を持っている。しかし，すべての連立一次方程式に適用することはできない。数学的にいうと，係数行列$\boldsymbol{A}$の対角要素を0にした行列のすべての固有値が1より小さくなければならない，という条件がついている。固有値の計算は，連立一次方程式の計算より厄介なので，実際に固有値を計算して上の条件をたしかめることは実用上無意味である。これにかわるものとして，次の近似的な条件式がよく使われている。

$$\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|<2|a_{ii}| \quad (i=1\sim n)\cdots\cdots(14)$$

これは，行列 $\boldsymbol{A}$ の i 行目にある要素の絶対値の和は，その対角要素の絶対値の2倍以下でなければならない，という条件である。各列の要素についても同じようなことがいえる。

b） 共役傾斜法（conjugate gradient method）

連立一次方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ は，二次曲面

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b}=C \cdots\cdots(15)$$

の中心を求める式であると解釈することもできる。この性質を利用して，連立一次方程式を解くかわりに，二次曲面 式（15）の中心を求める方法が考えられる。共役傾斜法は，n次元空間の任意の1点 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ から出発して，繰返し計算により最も効率よく二次曲面 式（15）の中心

を求めようとするものであり，その計算手順は次のようになる。

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{r}^{(0)}=\boldsymbol{p}^{(0)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}\\&\alpha^{(i)}=\boldsymbol{p}^{T(i)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)},\ \beta^{(i)}=\frac{1}{\alpha^{(i)}}\boldsymbol{p}^{T(i)}\boldsymbol{r}^{(i)}\\&\boldsymbol{x}^{(i+1)}=\boldsymbol{x}^{(i)}+\beta^{(i)}\boldsymbol{p}^{(i)},\ \boldsymbol{r}^{(i+1)}=\boldsymbol{r}^{(i)}-\beta^{(i)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)}\\&\boldsymbol{r}^{(i)}=\frac{-1}{\alpha^{(i)}}\boldsymbol{r}^{T(i+1)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)},\ \boldsymbol{p}^{(i+1)}=\boldsymbol{r}^{(i+1)}+\boldsymbol{r}^{(i)}\boldsymbol{p}^{(i)}\end{aligned}\right\}\quad\cdots\cdots(16)$$

理論上は，n 回の繰返しで正解が得られるはずであるが実用上 $0.8n$ 回くらいの繰返しで十分な精度が得られるといわれている。上式の中で $\boldsymbol{x}^{(i)}$ は i 回目の繰返しで得られる解の近似値，$\boldsymbol{r}^{(i)}$ は $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(i)}$ とおいたときの誤差，$\boldsymbol{p}^{(i)}$ は $\boldsymbol{x}^{(i)}$ を改良する方向を示している。なお，式 (16) で計算される $\boldsymbol{p}^{(i)}$ には次の性質がある。

$$\boldsymbol{p}^{T(i)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)}=\alpha^{(i)},\ \boldsymbol{p}^{T(i)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}=0\ (i\neq j)\cdots(17)$$

このような性質のことを，$\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \cdots$ は $\boldsymbol{A}$ 共役である，と呼んでいる。この性質を利用すると，行列 $\boldsymbol{A}$ の逆行列を次のようにして求めることもできる。$\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}$, ……を横に並べた行列を $\boldsymbol{P}$，すなわち

$$\boldsymbol{P}=[\boldsymbol{p}^{(0)}\ \boldsymbol{p}^{(1)}\boldsymbol{p}^{(2)}\cdots]$$

と定義すると，式 (17) は次のように書き換えられる。

$$\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{D}\ (d_{ii}=a^{(i-1)},\ d_{ij}=0\ (i\neq j))\cdots(17')$$

式 (17′) の両辺の逆行列を求め，その結果を変形すると

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{P}^T=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{1}{\alpha^{(i)}}\boldsymbol{p}^{(i)}\boldsymbol{p}^{T(i)}\ \cdots\cdots\cdots(18)$$

が得られる。したがって，式 (16) の計算の途中結果である $\alpha^{(i)}$ と $\boldsymbol{p}^{(i)}$ を残しておくと，式 (18) で $\boldsymbol{A}$ の逆行列が計算できる。この方法では，逆行列の要素のうち必要とするものだけを計算することができるので，メモリーを節約したいときなどには有効な方法である。

3. 固有値と固有ベクトル

(1) 固有値および固有ベクトルの意味

式 (12) で右辺がそれぞれ $\lambda x_1, \lambda x_2, \lambda x_3$ となった式を考えてみよう。これを変形すると

$$\left.\begin{aligned}(4-\lambda)x_1+x_2+x_3&=0\\x_1+(4-\lambda)x_2+x_3&=0\\x_1+x_2+(4-\lambda)x_3&=0\end{aligned}\right\}\cdots\cdots(19)$$

となる。固有円振動数，座屈荷重，主応力，断面主軸まわりの断面二次モーメント等を求める問題では，このような式を解かなければならない。式 (19) は右辺が 0 であるから，この式の解は一般に $x_1=x_2=x_3=0$ である。しかし，左辺の係数行列のデターミナントが 0 の場合は，事情が異なってくる。

$$\begin{Vmatrix}4-\lambda&1&1\\1&4-\lambda&1\\1&1&4-\lambda\end{Vmatrix}=-\lambda^3+12\lambda^2-45\lambda+54=0\cdots(20)$$

の根は，$\lambda=6, 3, 3$ であるが，この λ の値のことを固有値と呼んでいる。

式 (19) の λ に固有値を代入すると，デターミナントが 0 になるから，少なくとも 1 つの式が他の 2 式から導びかれる。いいかえると独立でなくなる。そこで，独立でない式を除いて，独立な式だけを用いて 0 でない解を求めることにすると次のようになる。まず，$\lambda=6$ を代入し，第 3 式を除いて第 1，第 2 式を解くと，$x_1=x_2=x_3$ が得られる。x_3 は自由にえらべるので $x_3=1$ とおくと，解は

$x_1^{(1)}=1, x_2^{(1)}=1, x_3^{(1)}=1$ または，$\boldsymbol{x}^{(1)}=(1, 1, 1)^T$

となる。次に $\lambda=3$ を式 (19) に代入してみる。この λ の値は式 (20) の重根なので，第 2，第 3 式は独立でない。第 1 式と同じになってしまう。第 1 式の解は $x_1=-x_2-x_3$ となり，前と同じように $x_3=1$ とおいても，まだ x_2 が自由にえらべる。そこで，$x_2=1$ および $x_2=-1$ とおいて 2 個の解を求めると

$x_1^{(2)}=-2, x_2^{(2)}=1, x_3^{(2)}=1$ または $\boldsymbol{x}^{(2)}=(-2, 1, 1)^T$

$x_1^{(3)}=0, x_2^{(3)}=-1, x_3^{(3)}=1$ または $\boldsymbol{x}^{(3)}=(0, -1, 1)^T$

が得られる。x_2 を 1 および -1 とした理由は，$\boldsymbol{x}^{(2)}$ と $\boldsymbol{x}^{(3)}$ が直交する ($\boldsymbol{x}^{T(2)}\boldsymbol{x}^{(3)}=0$) ようにきめたかったからである。このようにしてきめた，$\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \boldsymbol{x}^{(3)}$ のことを，それぞれ固有値 $\lambda=6, 3, 3$ に対応する固有ベクトルと呼んでいる。以上の説明では，x_3 が 1 となるように固有ベクトルをきめたが，これ以外のきめかたもある。たとえば，固有ベクトルの大きさが 1 となるように，いいかえると，$\boldsymbol{x}^{T(i)}\boldsymbol{x}^{(i)}=1$ となるように，きめる方法もある。むしろ後者のほうが一般的であるが，説明を簡単にするために前者の方法をとった。

一般に，次に示す n 元の連立一次方程式は

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}\lambda\ \text{または}\ (\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{O}\ \cdots\cdots\cdots\cdots(21)$$

左辺の係数行列 $(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})$ のデターミナントが 0 になるときに限って，0 でない解が存在する。$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})$ のデターミナントは λ の多項式であるが，これを 0 とおいた代数方程式の根を $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}, \cdots\lambda^{(n)}$ とすると，これが固有値である。この固有値の 1 つを式 (21) に代入したときの解が，その固有値に対応する固有ベクトルである。式 (21) は，さらに一般化された形，たとえば

$$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{O},\qquad \boldsymbol{A}(\lambda)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{O}$$

になることもあるが，これにはふれないことにする。元数 n が大きくなると，代数方程式をつくることおよびその根を求めることは，大変な作業になるので，数値計算の立場からは好ましいことではない。これにかわる方

法が考えられている。以下，対称行列に限ってその固有値と固有ベクトルを求める二，三の方法について説明する。

（2） 直 接 法

式 (21) の左から正則行列 $\boldsymbol{S}_1$ を掛け，$\boldsymbol{x}$ の前に $\boldsymbol{S}_1^{-1}\boldsymbol{S}_1=\boldsymbol{E}$ をはさむと

$$\boldsymbol{S}_1(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})\boldsymbol{S}_1^{-1}\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{x}=\boldsymbol{O}$$

が得られる。さらに，これを繰返すことによって

$$[\boldsymbol{S}_m\cdots\boldsymbol{S}_2\boldsymbol{S}_1](\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})[\boldsymbol{S}_1^{-1}\boldsymbol{S}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{S}_m^{-1}]\{\boldsymbol{S}_m\cdots\boldsymbol{S}_2\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{x}\}=\boldsymbol{O}\qquad(22)$$

が得られるが，$[\boldsymbol{S}_m\cdots\boldsymbol{S}_1]$ で表わされる行列のデターミナントは，$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})$ のデターミナントと同じであるから，両者の固有値も一致する。$[\boldsymbol{S}_m\cdots\boldsymbol{S}_1]$ で表わされる行列は

$$(\boldsymbol{S}_m\cdots\boldsymbol{S}_2\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}_1^{-1}\boldsymbol{S}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{S}_m^{-1})-\lambda\boldsymbol{E}\qquad(23)$$

とも書けるから，行列 $\boldsymbol{A}$ の左右から正則行列 $\boldsymbol{S}_i$ とその逆行列 $\boldsymbol{S}_i^{-1}$ を掛けることを繰返して対角行列をつくることができれば，その対角要素が行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値になる。また，このようにして対角化された行列の固有ベクトルは，単位行列の 1 つの列と一致するので，これを式 (22) の $\{\boldsymbol{S}_m\cdots\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{x}\}$ に等しいとおいて，$\boldsymbol{A}$ の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ を求めると，それは行列 $[\boldsymbol{S}_1^{-1}\boldsymbol{S}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{S}_m^{-1}]$ の 1 つの列に一致する。

a） ヤコビ（Jacobi）の方法

$\boldsymbol{S}$ として，$\boldsymbol{S}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}^{-1}$ を計算したとき $\boldsymbol{A}$ の非対角要素，たとえば a_{ij}，を 0 にするような行列を採用する。行列 $\boldsymbol{S}$ の要素は，$s_{ii}=s_{jj}=\cos\theta$, $s_{ji}=-s_{ij}=\sin\theta$，その他の対角要素は 1，非対角要素は 0，となっている。ただし

$$\left.\begin{matrix}\sin\theta\\ \cos\theta\end{matrix}\right\}=\left\{\frac{\sqrt{1+t^2}\mp1}{2\sqrt{1+t^2}}\right\}^{1/2},\quad t=\frac{2a_{ij}}{a_{jj}-a_{ii}}$$

$\boldsymbol{S}$ は直交行列であるから，$\boldsymbol{S}^{-1}=\boldsymbol{S}^T$ の関係がある。この $\boldsymbol{S}$ を用いて $\boldsymbol{S}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}^T$ をつくると，行列 $\boldsymbol{A}$ の i 行と i 列および j 行と j 列が変化する。したがって，(i,j) 要素を 0 にしたあとで，(i,k) または (k,j) 要素を 0 にすると，(i,j) 要素は 0 でなくなってくるが，非対角要素は次第に小さくなるので，近似的に対角化ができる。

b） ハウスホルダー（Householder）の方法

ヤコビの方法では，一度 0 にした非対角要素が，あとで 0 でなくなる，という欠点があった。この欠点をなくすために，$\boldsymbol{S}$ として **1.(3)** の最後で説明した素行列の形をした直交行列，すなわち $\boldsymbol{E}-2\boldsymbol{V}_i\boldsymbol{V}_i^T$，を用いることにしたのがハウスホルダーの方法である。列ベクトル $\boldsymbol{V}^T$ として

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{V}_i^T=\frac{1}{\alpha_i}[0,\cdots,0,\ a_{ii+1}^{(i)}+s_i,\ a_{ii+2}^{(i)},\cdots a_{in}^{(i)}]\\&\alpha_i^2=2(s_i^2+a_{ii+1}^{(i)}s_i),\ s_i^2=\sum_{j=i+1}^{n}\{a_{ij}^{(i)}\}^2\end{aligned}\right\}$$

$$(i=1\sim n-2)$$

を用いると，$\boldsymbol{A}$ は対角要素とその前後の要素以外は全部 0 になった三連行列に変換される。三連行列の固有値は簡単に求められる。たとえば，これを三角化して $\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{R}$ を求め，順序を変えて掛け合せる操作を繰返すと，次第に対角行列に近づく。固有ベクトルは，三連行列の固有ベクトルを求めてから，それに

$$(\boldsymbol{E}-2\boldsymbol{V}_{n-2}\boldsymbol{V}_{n-2}^T)\cdots(\boldsymbol{E}-2\boldsymbol{V}_2\boldsymbol{V}_2^T)(\boldsymbol{E}-2\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{V}_1^T)$$

を掛ければよい。

（3） 反 復 法

式 (21) を次のように書きかえ

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)},\quad \boldsymbol{x}^{(k+1)}=\frac{1}{x_m^{(k)}}\boldsymbol{y}\qquad(24)$$

任意の列ベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)}$（ただし，m 番目の要素 $x_m^{(0)}$ は 1 とする）を初期値にして繰返し計算をすると，$x_m^{(k)}$ は次第に絶対値最大の固有値に近づき，$\boldsymbol{x}^{(k)}$ はそのときの固有ベクトルに近づく。これは，$\boldsymbol{A}^m$（m は正または負の整数）の固有値は $\boldsymbol{A}$ の固有値の m 乗に等しく，固有ベクトルは $\boldsymbol{A}$ の固有ベクトルに等しい，という性質を利用した反復法であり，最大固有値だけが必要なときに有効な計算法である。最小固有値が必要なときは，$\boldsymbol{A}^{-1}$ の最大固有値を求めるか，$\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{E}$ の固有値は，$\boldsymbol{A}$ の固有値から μ を引いたものであり，固有ベクトルは変わらないという性質を利用し，十分大きな μ を用いた行列 $(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{E})$ の最大固有値を求めればよい。

2 番目に大きな固有値が必要なときは，絶対値最大の固有値 λ_1 とそのときの固有ベクトル $\boldsymbol{x}_1$ を用いて

$$\boldsymbol{A}^*=\boldsymbol{A}-\frac{\lambda_1}{\boldsymbol{x}_1^T\boldsymbol{x}_1}\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}^T$$

をつくり，$\boldsymbol{A}^*$ の最大固有値を求めればよい。$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{A}^*$ の固有値は λ_1 を除くと同じである。そして，$\boldsymbol{A}$ の λ_1 に相当する $\boldsymbol{A}^*$ の固有は 0 になっている。

参 考 文 献

1) 赤阪 隆：数値計算，コロナ社，応用数学講座，1967
2) 一松 信：数値計算，至文堂，近代数学新書，1963
3) 大地羊三：電子計算機の手法とその応用，森北出版，土木工学大成，1970
4) Conte S.D. : Elementary Numerical Analysis, McGraw Hill, 1965
5) Fröberg C.E. : Introduction to Numerical Analysis, Addison-Wislay, 1966
6) Ralston A. & H.S. Wilf : Mathematical Methods for Digital Computer Vol. 1, 2, Willey, 1967