5　線形方程式の数値解法

5.1　連立一次方程式

　変数の数が N の独立な一次方程式が以下のように N 個与えられたとき

$$
\begin{aligned}
a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \cdots + a_{1,N}x_N &= b_1 \\
a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \cdots + a_{2,N}x_N &= b_2 \\
&\cdots \\
a_{N,1}x_1 + a_{N,2}x_2 + \cdots + a_{N,N}x_N &= b_N
\end{aligned}
\tag{5.1}
$$

これは，行列によって，

$$
A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b} \tag{5.2}
$$

として，行列の逆行列を使って連立方程式を解くことができる．ただし，一般にはこうした逆行列 A^{-1} を直接に生成して解を求めることは計算の手間と精度の問題からかならずしも適切ではないことが多い．逆行列の計算は一般には

$$
A^{-1} = \frac{\mathrm{Adj}(A)}{|A|} \tag{5.3}
$$

　ただし，Adj(A) は行列 A の随伴行列，$|A|$ は行列 A の行列式を表す．

　逆行列を生成することなく効率的に上記の連立一次方程式を解くための方法として，大きく直接解法と反復法とに分けることができる．以下にそれらの代表的な手法について解説をする．

5.2　直接解法

　直接解法は定まった回数の処理手順で正確な解を得る手法である．以下の説明において，L は下三角行列，U は上三角行列，I は単位行列，D は対角のみに 0 以外の要素がある対角行列を表すものとする．

ガウスの消去法

　これは，連立一次方程式を，

$$
A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^* \tag{5.4}
$$

のように上三角行列の形に変形するものである．行列 A を上三角行列 U に変換する過程を**前進消去**とよび，変数ベクトルの最後の要素 x_N から順に解いていく過程を**後退代入**とよぶ．数値計算の観点からは，前進消去の過程で，消去に用いる $a_{i,i}$ の絶対値が小さいときに誤差が生じやすい．そのため，$a_{i,i} \cdots a_{N,i}$ の中で最大の絶対値を持つ行を選択して行の入れ替えを行う．これを**ピボット選択**とよぶ．ガウスの消去法においては，変数の数 N に対して約 $N^3/3$ 回の乗算が発生する．

　【練習問題 5-1】
以下の連立一次方程式をガウスの消去法により解いてみよ．

$$
\begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 1 & -1 & 5 \\ 4 & 1 & -2 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 28 \\ 7 \\ 21 \end{bmatrix}
\tag{5.5}
$$

ガウス・ジョルダン法

ガウス・ジョルダン法は，ガウス法の前進消去の過程を拡張して，

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad I\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{**} \tag{5.6}$$

とするものである．この方法ではガウスの消去法にあった後退代入の過程が不要であるが，乗算回数は $N^3/2$ 回となり，ガウスの消去法よりも多くの乗算が生じる．

LU 分解法

正則な行列 A は下三角行列 L と上三角行列 U の積に分解できることを利用して

$$A\boldsymbol{x} = LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{5.7}$$

$$L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \tag{5.8}$$

$$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \tag{5.9}$$

上三角行列と下三角行列の連立一次方程式は容易に解くことができる．これを**LU 分解法**または**三角分解法**と呼ぶ．L と U の分解に際しては任意性が有るため，L の対角要素 $l_{k,k}$ をすべて 1 とする**ドゥリットル (Doolittle) 法**と，U の対角要素 $u_{k,k}$ をすべて 1 とする**クラウト (Crout) 法**とがある．

LU 分解の具体的な手順をドゥリットル法を例に以下に示す．

ステップ１： L の第一列，U の第一行を以下のように設定する．

$$u_{1,j} = a_{1,j}, \quad l_{j,1} = a_{j,1}/u_{1,1} \quad (j = 1, 2, \cdots, N) \tag{5.10}$$

ステップ２： L の第 k 列，U の第 k 行を次のように順に計算する．$(k = 2, \cdots, N)$

$$a_{j,k}^{(k)} = a_{j,k} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{j,i}u_{i,k} \quad (j = k, k+1, \cdots, N) \tag{5.11}$$

$$u_{k,k} = a_{k,k}^{(k)} \tag{5.12}$$

$$u_{k,j} = a_{k.j} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{k,i}u_{i,j} \quad (j = k+1, \cdots, N) \tag{5.13}$$

$$l_{j,k} = \frac{a_{j,k}^{(k)}}{u_{k,k}} \quad (j = k+1, \cdots, N) \tag{5.14}$$

LU 分解法の計算量はガウスの消去法と変わりがないが，L と U を繰り返し使用するような計算の場合に有効である．

【練習問題 5-2】
練習問題 5-1 で示した行列を LU 分解せよ．

改訂コレスキー法

行列 A が $a_{i,j} = a_{j,i}$ となる対称行列の場合には，より効率的な計算方法が存在する．いま，上三角行列 U に関して，対角要素以外すべて 0 である行列 D と対角要素がすべて 1 の上三角行列 R とを用いて，$U = DR$ として

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad LDR\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad R^T DR\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{5.15}$$

に基づいて計算を行う方法を**改訂コレスキー法** (**modified Cholesky decomposition**) あるいは**修正コレスキー分解**とよぶ．これは，行列 A が対称であることから，$(LDR)^T = LDR$ が成り立ち，$L = R^T$ となることを用いている．解を求める計算は LU 分解法と同様に,

$$R^T \boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \tag{5.16}$$

$$DR\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \tag{5.17}$$

として行う．行列 D が対角行列であることから，LU 分解の約半分の計算量で計算することができる．

5.3 反復法

直接法においては行列 A のサイズ n が大きくなると計算量が n^3 に比例して増大してくる．しかしながら，一般の問題においては行列 A には多くの 0 が含まれるのが通常である[1].

その場合，ある初期解 $\boldsymbol{x_0}$ から出発して段階的に解を改善していく反復法が有効となる．反復法では，行列 A を $M - N$ の形に分解して

$$M\boldsymbol{x_{k+1}} = N\boldsymbol{x_k} + \boldsymbol{b} \tag{5.18}$$

の形を考える．$\boldsymbol{x_{k+1}} = \boldsymbol{x_k}$ が成り立つとき，上の式は $(M - N)\boldsymbol{x_k} = A\boldsymbol{x_k} = \boldsymbol{b}$ が成り立ち，連立一次方程式の解を与えることがわかる．ここで，行列 M の逆行列 M^{-1} が容易に求まるように M を選ぶと,

$$\boldsymbol{x_{k+1}} = M^{-1}N\boldsymbol{x_k} + M^{-1}\boldsymbol{b} \tag{5.19}$$

という形で，解候補 $\boldsymbol{x_{k+1}}$ の漸化式を得る．行列 $M^{-1}N$ とベクトル $M^{-1}\boldsymbol{b}$ はどちらも定値であるから一度計算するだけでよい.

式 (5.19) が収束するための十分条件は $M^{-1}N$ が縮小写像であることである．すなわち,

$$\| M^{-1}N\boldsymbol{x} - M^{-1}N\boldsymbol{y} \| \leq \| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} \| \tag{5.20}$$

反復法においては，行列 M の取り方でいくつかの方法に分かれる．ただ，どれも近似解を求めるものであり,

$$|x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \epsilon, \quad \text{または,} \quad |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \epsilon |x_i^{(k)}| \tag{5.21}$$

が成り立つまで反復を繰り返す.

以下に反復法の代表的な方法について触れることにする．

ヤコビ法

ヤコビ (Jacobi) 法は，行列 A の対角成分のみを取り出して行列 M とするものである．具体的には,

$$M = D = \begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & & 0 \\ 0 & a_{2,2} & 0 & \cdots & 0 \\ & & \cdots & & \\ 0 & 0 & \cdots & a_{N-1,N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{N,N} \end{bmatrix}, \quad N = D - A \tag{5.22}$$

[1] たとえば，補間で紹介したスプライン補間を表す連立方程式などは対角成分前後以外の値は 0 である．

である．対角行列 $[a_{k,k}]$ の逆行列はすぐに求めることができる．ヤコビ法において反復法が収束するための十分条件としては，行列 A に関して，

$$\max_{1\leq i\leq N} \frac{1}{|a_{i,i}|}\left(\sum_{j=1,\neq i}^{N} |a_{i,j}|\right) \quad < \quad 1 \tag{5.23}$$

が成り立つことである．これは，行列 A の対角成分の絶対値が，他の値と比べて十分に大きいことを意味しており，こうした条件を満足する行列を**対角優越な行列**と呼ぶ．

【練習問題 5-3】

以下にあげる 2 元一次の連立方程式を初期値 $x = y = 0$ としてヤコビ法で計算してみよ．ちなみにこの連立方程式の解は $x = y = 1.0$ である．また，式の順番を入れ替えた行列が対角優越な行列とならず，ヤコビ法での計算した結果が異なることを確認せよ．

$$\begin{aligned} 5x - y &= 4 \\ x + 5y &= 6 \end{aligned}$$

ガウス・ザイデル法

ガウス・ザイデル (Gauss-Seidel) の方法は

$$A = D + E + F, \quad M = D + E, \quad N = -F \tag{5.24}$$

ただし，行列 D は行列 A の対角成分をとりだしたもの，行列 E は行列 A から対角を含めた上三角行列の要素をすべて 0 としたもの，行列 F は行列 A から対角を含めた下三角行列の要素をすべて 0 としたものである．よって，$M = D + E$ は下三角行列になり，逆行列を容易に求めることができる．

SOR 法

SOR(Successive Over Relaxation) 法は，ガウス・ザイデル法にパラメータ ω を導入して，

$$M = \frac{1}{\omega}(D + \omega E), \quad N = \frac{1}{\omega}[(1-\omega)D - \omega F] \tag{5.25}$$

としてもので，$\omega = 1$ のとき，ガウス・ザイデル法に一致する．また，$\omega > 1$ で収束が加速されるが，一般には $1 \leq \omega < 2$ の範囲で使用される．パラメータ ω は**緩和係数**と呼ばれる．

上記のガウス・ザイデル法，SOR 法ともに対角優越な行列に対して適用可能である．

5.4　方程式の安定性

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ において，係数行列 A が $A + \Delta A$ に変化すると，その解も $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}$ へと変化する．いま，

$$x_1 + x_2 \quad = \quad 1 \tag{5.26}$$

$$1.01x_1 + x_2 \quad = \quad 2 \tag{5.27}$$

という連立一次方程式の解は，$x_1 = 100, \quad x_2 = -99$ であるが，式 (5.27) の x_2 の係数をたとえば 0.009 だけ増加させると，$x_1 = 991, \quad x_2 = -990$ となり，解の値が 10 倍ほど大きく変わる．

こうした問題構造は，計測誤差や計算精度などによって大きく解の値が異なってしまうので，扱いには十分注意が必要である．