第9章 連立一次方程式の解法

本章では連立一次方程式の直接解法について学ぶ。最初に数値計算において連立一次方程式の求解が必要となる場面を復習し、係数行列の様々な性質について学んだ後、もっとも基本的な直接解法であるガウス消去法を詳しく学ぶ。次に、同じ係数行列を持ち右辺ベクトルのみが異なる複数の方程式を解くのに有用な LU 分解について学び、最後に係数行列の様々な性質を利用して計算量と計算に必要な記憶領域を削減する方法について考える。

9.1 数値計算における連立一次方程式

本章では、 n 個の未知数 $x_1, x_2, \dots, x_n$ に対する n 個の連立方程式

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (9.1)$$

を考える。係数行列を A 、解ベクトルを $\mathbf{x}$ 、右辺ベクトルを $\mathbf{b}$ で表すと、これは

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (9.2)$$

と書ける。以下、行列 A は正則、すなわち $\det A \neq 0$ と仮定する。このとき、 A の逆行列 A^{-1} が存在し、連立一次方程式の解は形式的に $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ と書ける。これを数値計算により実際に求めることが、本章の主題である。

連立一次方程式の解を求めることは、数値計算の様々な場面で必要となる。以下に例を挙げる。

(i) 非線形連立方程式に対するニュートン法 非線形連立方程式 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ に対するニュートン法の反復式は

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(k)}} \right)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (9.3)$$

となる。ここで、ヤコビアン $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}$ の逆行列をかけるために連立一次方程式の求解が必要となる。

- 帯行列： 対角線とその下の b 本，及びその上の b 本の斜めの列のみが非零の行列。帯行列を式で定義すると，「 $|i - j| > b$ のとき $a_{ij} = 0$ の行列」となる。 b を半帯幅と呼ぶ。前節 (iv) の行列は，未知数を $u_{11}, u_{12}, \dots, u_{1,N-1}, u_{21}, u_{22}, \dots, u_{N-1,N-1}$ の順に並べ，方程式も同じ順に並べると，半帯幅 $N - 1$ の帯行列になる。
- 上三角行列： 対角線とそれより上の要素のみが非零の行列。
- 下三角行列： 対角線とそれより下の要素のみが非零の行列。
- 疎行列： 上記の行列のような規則的な構造は持たないが，要素の大部分（たとえば 90%以上）が 0 の行列。

(b) 対称性

- 対称行列： $a_{ij} = a_{ji}$ （すなわち $A^t = A$ ）の行列。前節 (iii)，(iv) は対称行列の例である。また，(ii) は補間点が等間隔ならば対称行列になる（教科書 p. 28 参照）
- 非対称行列： 対称でない行列。

(c) 数値的性質

- 正定値行列： 任意のベクトル x に対して $x^t Ax > 0$ となる行列。正定値行列は正則行列である（証明せよ）
- 対角優位行列： $\sum_{j \neq i} |a_{ij}| < |a_{ii}|$ がすべての i に対して成り立つ行列。前節 (ii)，(iii) の行列は対角優位行列である。また，ある行列が対称かつ対角優位で，かつ対角成分がすべて正ならば正定値である（証明せよ）

これらの性質をうまく使うと，連立一次方程式を解くための計算量や，計算に必要な記憶領域を減らすことができる。これについては 9.5 節で述べる。

9.3 ガウスの消去法

本節では，直接解法の中でもっとも基本的な解法であるガウスの消去法を説明する。この方法は，任意の正則行列を係数とする連立一次方程式に対して適用可能である。この方法では，まず方程式 $Ax = b$ を上三角行列 U を係数とする方程式 $Ux = c$ に変形する。後に見るように上三角行列を係数とする方程式は代入計算によって容易に解けるので，これにより解 x を求めることができる。

9.3.1 アルゴリズム

原理 連立一次方程式 (9.2) の係数行列を上三角行列に変形するため、まず係数 $a_{21}, a_{31}, \dots, a_{n1}$ を消去する。そのため ($a_{11} \neq 0$ と仮定して) 第1番目の方程式に a_{i1}/a_{11} を掛けた式を第 i 式 ($i = 2, \dots, n$) から引くと、連立方程式は次のようになる。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ a_{32}^{(2)}x_2 + a_{33}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + a_{n3}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)} \end{cases} \quad (9.6)$$

ここで、上付き添字 (2) は、消去演算によって変化した係数であることを示す。次に ($a_{22}^{(2)} \neq 0$ と仮定して) 第2番目の方程式に $a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}$ を掛けた式を第 i 式 ($i = 3, \dots, n$) から引くと、第3番目以降の方程式で x_2 の係数が消え、連立方程式は次のようになる。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)} \\ \vdots \\ a_{n3}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{nn}^{(3)}x_n = b_n^{(3)} \end{cases} \quad (9.7)$$

こうして、「第 k ステップでは第 k 番目の方程式に $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ を掛けて第 i 式 ($i = k+1, \dots, n$) から引く」という操作 (消去演算と呼ぶ) を第 $n-1$ ステップまで繰り返すと、係数行列 A は次のように上三角行列に変形される。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)} \\ \vdots \\ a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)} \end{cases} \quad (9.8)$$

このときの係数行列を U 、右辺ベクトルを c と書く。この形の連立一次方程式 $Ux = c$ は簡単に解くことができる。すなわち、第 n 式より x_n を求め、次にそれを第 $n-1$ 式

$$a_{n-1,n-1}^{(n-1)}x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)}x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \quad (9.9)$$

に代入して x_{n-1} を求め、更に x_n と x_{n-1} を第 $n-2$ 式

$$a_{n-2,n-2}^{(n-2)}x_{n-2} + a_{n-2,n-1}^{(n-2)}x_{n-1} + a_{n-2,n}^{(n-2)}x_n = b_{n-2}^{(n-2)} \quad (9.10)$$

に代入して x_{n-2} を求めるというように、下から順々に代入計算を行っていけばよい。この操作を後退代入と呼ぶ。

数値例 3元の連立一次方程式の求解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 5 & 4 \\ 4 & 6 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 17 \\ 23 \end{pmatrix} \quad (9.11)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & -2 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -7 \\ -9 \end{pmatrix} \quad (9.12)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -7 \\ 5 \end{pmatrix} \quad (9.13)$$

$$\Rightarrow x_3 = 1, \quad x_2 = 2, \quad x_1 = 1 \quad (\text{後退代入による}) \quad (9.14)$$

アルゴリズム ガウスの消去法のアルゴリズムを以下に示す。ここで, A, b はそれぞれ係数行列, 右辺ベクトルを格納する配列である。最初の3重ループで係数行列の上三角行列への変形, 次の2重ループで後退代入を行っている。解は配列 b に入る。なお, $\text{do } k=n, 1, -1$ は, ループを n から 1 まで逆に回すという意味である。

```
input(A,b)
do k=1, n
  do i=k+1, n
    do j=k+1, n
      a(i,j) = a(i,j) - a(k,j)*a(i,k)/a(k,k)
    end do
    b(i) = b(i) - b(k)*a(i,k)/a(k,k)
  end do
end do
do k=n, 1, -1
  do j=k+1, n
    b(k) = b(k) - a(k,j)*b(j)
  end do
  b(k) = b(k)/a(k,k)
end do
output(b)
```