計算物理学２第６回：連立方程式の解法

ver. 2019/6/21

n 元 1 次連立方程式

$$\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1, \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2, \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n &= b_3, \\
&\vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n,
\end{aligned}$$

の解法について説明します。大きく分けて、消去法 (elimination) と反復法 (iteration) による解法があります。消去法は係数 a や b の値を変更して解を導出する方法、反復法は近似解を更新してゆくことで真の解に近づけてゆく方法です。

1　消去法

1.1　Gauss の消去法

先程の連立一次方程式は行列の形で

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

と書けます。ここで A は $n \times n$ の行列

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} \tag{2}$$

で、$\boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{x}$ は列ベクトル

$$\boldsymbol{b}^{(1)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \tag{3}$$

です。これから A と $\boldsymbol{b}$ に操作を加えて値を変えていきますのでその初期値ということで $^{(1)}$ をつけています。

まずはこの連立一次方程式を変換し、A' を上三角行列とする形に持っていきます。

$$A'\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}' \tag{4}$$

ここで

$$A' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2n} \\ 0 & 0 & a'_{33} & \cdots & a'_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a'_{nn} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{b}' = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ \vdots \\ b'_n \end{pmatrix}, \tag{5}$$

式 (2) から (5) への変換は以下のように行います。a_{11} がゼロでないとして (ゼロの場合は他の行と順番を入れ替えます)、i 行目の式 $(2 \leq i \leq n)$

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3 + \cdots + a_{in}x_n = b_i \tag{6}$$

から 1 行目の式に a_{i1}/a_{11} を掛けたもの

$$a_{i1}x_1 + \frac{a_{12}a_{i1}}{a_{11}}x_2 + \frac{a_{13}a_{i1}}{a_{11}}x_3 \cdots + \frac{a_{in}a_{i1}}{a_{11}}x_n = \frac{a_{i1}}{a_{11}}b_i \tag{7}$$

を引くことで、i 行目の式から x_1 の項を消すことができます。i を 2 から n までこの操作を行うことで行列 A と $\boldsymbol{b}$ は

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} a^{(1)}_{11} & a^{(1)}_{12} & a^{(1)}_{13} & \cdots & a^{(1)}_{1n} \\ 0 & a^{(2)}_{22} & a^{(2)}_{23} & \cdots & a^{(2)}_{2n} \\ 0 & a^{(2)}_{32} & a^{(2)}_{33} & \cdots & a^{(2)}_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a^{(2)}_{n2} & a^{(2)}_{n3} & \cdots & a^{(2)}_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(2)} = \begin{pmatrix} b^{(1)}_1 \\ b^{(2)}_2 \\ b^{(2)}_3 \\ \vdots \\ b^{(2)}_n \end{pmatrix} \tag{8}$$

行列要素は 1 行目は不変で、2 行目以降は $A^{(1)}$ のものと値が変わります。

$$a^{(2)}_{ij} = a^{(1)}_{ij} - \frac{a^{(1)}_{i1}a^{(1)}_{1j}}{a^{(1)}_{11}}, \quad (2 \leq i, j \leq n) \tag{9}$$

$$b^{(2)}_i = b^{(1)}_i - \frac{a^{(1)}_{i1}b^{(1)}_1}{a^{(1)}_{11}} \tag{10}$$

続いて、この行列 $A^{(2)}$ と列ベクトル $\boldsymbol{b}^{(2)}$ に対して、同様に $a^{(3)}_{32}, a^{(3)}_{42}, \cdots a^{(3)}_{n2}$ がゼロとなるように 3 行目から n 行目までを変換し ($a^{(2)}_{22} \neq 0$ とします)、行列 $A^{(3)}$ と列ベクトル $\boldsymbol{b}^{(3)}$ を作ります。

$$A^{(3)} = \begin{pmatrix} a^{(1)}_{11} & a^{(1)}_{12} & a^{(1)}_{13} & \cdots & a^{(1)}_{1n} \\ 0 & a^{(2)}_{22} & a^{(2)}_{23} & \cdots & a^{(2)}_{2n} \\ 0 & 0 & a^{(3)}_{33} & \cdots & a^{(3)}_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a^{(3)}_{n3} & \cdots & a^{(3)}_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(3)} = \begin{pmatrix} b^{(1)}_1 \\ b^{(2)}_2 \\ b^{(3)}_3 \\ \vdots \\ b^{(3)}_n \end{pmatrix} \tag{11}$$

ここで新しく現れた $^{(3)}$ が付いている各成分は

$$a^{(3)}_{ij} = a^{(2)}_{ij} - \frac{a^{(2)}_{i2}a^{(2)}_{2j}}{a^{(2)}_{22}} \tag{12}$$

$$b^{(3)}_i = b^{(2)}_i - \frac{a^{(2)}_{i2}b^{(2)}_2}{a^{(2)}_{22}} \tag{13}$$

となります。さらに $(A^{(4)}, \boldsymbol{b}^{(4)})$, $(A^{(5)}, \boldsymbol{b}^{(5)}), \cdots$、と繰り返してゆくと、最終的に $A^{(n)}$ として上三角行列の形になったものが得られます。プログラムでは $A^{(k)}$ と $\boldsymbol{b}^{(k)}$ を用いて $A^{(k+1)}$ と $\boldsymbol{b}^{(k+1)}$ を計算するときにその行列要素は

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad (k \le i, j \le, n) \tag{14}$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} b_k^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \tag{15}$$

で与えられる、これを k が 1 から n まで順番に行う、という式でまとめて書くことができます。$A^{(n)}$ までこれらの操作を行うと最終的に

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(3)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}, \tag{16}$$

となり、$A^{(n)}$ は上三角行列となります。この操作を前進消去 (forward elimination) と言います。

n 行目の方程式は

$$a_{nn}^{(n)} x_n = b_n^{(n)} \tag{17}$$

となり解は

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \tag{18}$$

として求まります。その一つ手前の $n-1$ 行目の式は

$$a_{n-1n-1}^{(n-1)} x_{n-1} + a_{n-1n}^{(n-1)} x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \tag{19}$$

ですが、式 (18) を使うと x_{n-1} が求められます。

$$x_{n-1} = \frac{1}{a_{n-1n-1}^{(n-1)}} (b_{n-1}^{(n-1)} - a_{n-1n}^{(n-1)} x_n) \tag{20}$$

このように、n 行目から始めて順番に x_k を求めることができます。$x_{k+1}, \cdots x_n$ の解が求まっているとき、x_k は

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}^{(k)}} \left[b_k^{(k)} - \sum_{i=k+1}^{n} a_{ki}^{(k)} x_i \right] \tag{21}$$

で与えられます。これは後退代入 (backward substitution) と呼ばれ、n 行目から 1 行目まで順番に行うことで $\boldsymbol{x}$ のすべての成分を求めることができます。

1.2 Gauss-Jordan の消去法

同じく連立一次方程式を解く方法ですが、行列 A を変換するときに上三角行列にせずに単位行列に変換する方法です。

はじめに $A^{(1)}$ からスタートし、次のステップでは一行目の方程式の x_1 の係数を 1 とするため方程式を $a_{11}^{(1)}$ で割り、それを用いて他の方程式から x_1 の項をすべて消去します。

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(2)} = \begin{pmatrix} b_1^{(2)} \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{pmatrix} \tag{22}$$

ここで

$$a_{1j}^{(2)} = \frac{a_{1j}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad (1 \le j \le n) \tag{23}$$

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)} a_{1j}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \quad (i \neq 1) \tag{24}$$

$$b_1^{(2)} = \frac{b_1^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \tag{25}$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)} b_i^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \tag{26}$$

次のステップでは 2 番目の方程式の x_2 の係数を 1 とするため $a_{22}^{(2)}$ で方程式を割り、それを用いて 1 番目を含むほかのすべての式から x_2 の項を消去します。

$$A^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & a_{13}^{(3)} & \cdots & a_{1n}^{(3)} \\ 0 & 1 & a_{23}^{(3)} & \cdots & a_{2n}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(2)} = \begin{pmatrix} b_1^{(3)} \\ b_2^{(3)} \\ b_3^{(3)} \\ \vdots \\ b_n^{(3)} \end{pmatrix} \tag{27}$$

ここで

$$a_{2j}^{(3)} = \frac{a_{2j}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \tag{28}$$

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - \frac{a_{i2}^{(2)} a_{2j}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad (i \neq 2) \tag{29}$$

$$b_2^{(3)} = \frac{b_2^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \tag{30}$$

$$b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - \frac{a_{i2}^{(2)} b_i^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad (i \neq 2) \tag{31}$$

同様に、$A^{(k)}$ から $A^{(k+1)}$ を作るときは k 行目の対角要素が 1 にできて、他の行列要素は

$$a_{kj}^{(k+1)} = \frac{a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \tag{32}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad (i \neq k) \tag{33}$$

$$b_{k}^{(k+1)} = \frac{b_{k}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \tag{34}$$

$$b_{i}^{(k+1)} = b_{i}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} b_{i}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad (i \neq k) \tag{35}$$

となります。$n+1$ までこの操作を繰り返すと $A^{(n+1)}$ は単位行列となっているため、解は

$$x_i = b_i^{(n+1)} \tag{36}$$

で与えられます。

2 反復法

反復法は連立方程式の問題に限らず数値計算で広く使われる方法です。求めたい解を一発で計算するのではなく、近似解として適当な値からスタートし、その値を更新してゆくことで真の解に収束させる方法です。ここでは Jacobi 法、Gauss-Seidel 法と SOR 法を紹介します。

2.1 Jacobi 法

連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ で、i 行目の式は

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots a_{in}x_n = b_i \tag{37}$$

ですが、$a_{ii} \neq 0$ のとき x_i のみを左辺に残すと

$$x_i = \frac{b_i - \displaystyle\sum_{j(\neq i)} a_{ij}x_j}{a_{ii}} \tag{38}$$

となります。これは、$x_1, x_2, \cdots x_n$ (x_i を除く) から x_i を計算するという式になっており、反復 k 回目の近似解 $\boldsymbol{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots x_n^{(k)})$ を右辺に代入し、

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \displaystyle\sum_{j(\neq i)} a_{ij}x_j^{(k)}}{a_{ii}} \quad (1 \leq i \leq n) \tag{39}$$

のように、$k+1$ 回目の近似解を計算することができます。これが Jacobi 法で、反復の結果、すべての i に対して $x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)}$ となればこれが解となります。数値的に収束したかどうかは、$|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k+1)}|$ の絶対値の大きさが十分小さければ収束したものとして判定します。収束は次の Gauss-Seidel 法より遅いですが、線形性を保っており、(39) 式の $x_i^{(k+1)}$ の計算で i に関してはどの順番で計算してもよく、並列計算に向いたアルゴリズムです。

2.2 Gauss-Seidel 法

Jacobi 法を改良したもので、反復で解を更新するのは同じですが、Jacobi 法では $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を用いて $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ を一斉に求めていました。Gauss-Seidel 法では利用できる最新のものを用います。つまり、x_1 については Jacobi 法と同じ

$$x_1^{(k+1)} = \frac{b_1 - \displaystyle\sum_{j=2}^{n} a_{1j} x_j^{(k)}}{a_{11}} \tag{40}$$

を用いますが、$x_2^{(k+1)}$ を計算する際には x_1 についてはすでに計算した $x_1^{(k+1)}$ がありますのでそれを使います。

$$x_2^{(k+1)} = \frac{b_2 - a_{21} x_1^{(k+1)} - \displaystyle\sum_{j=3}^{n} a_{2j} x_j^{(k)}}{a_{22}} \tag{41}$$

$x_3^{(k+1)}$ では $x_1^{(k+1)}$ と $x_2^{(k+1)}$ を $x_1^{(k)}$ と $x_2^{(k)}$ の代わりに用います。

$$x_3^{(k+1)} = \frac{b_3 - a_{31} x_1^{(k+1)} - a_{32} x_2^{(k+1)} - \displaystyle\sum_{j=4}^{n} a_{3j} x_j^{(k)}}{a_{33}} \tag{42}$$

同様に $x_i^{(k+1)}$ では $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \cdots x_{i-1}^{(k+1)}$ を用いて

$$x_i^{(k+1)} = \frac{b_i - \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}} \tag{43}$$

となります。Jacobi 法より早く解に収束しますが、異なる i に対する $x_i^{(k+1)}$ の計算を $i = 1, 2, \cdots, n$ の順番通りに行う必要があるため並列計算には向きません。

2.3　SOR 法

逐次加速緩和法 (Successive Over-Relaxation 法) は Gauss-Seidel 法にさらに加速パラメターを導入して高速化を図ったものです。SOR 法では

$$x_1^{(k+1)} =(1-\omega)x_1^{(k)} + \omega\frac{b_1 - \displaystyle\sum_{j=2}^{n} a_{1j}x_j^{(k)}}{a_{11}}, \tag{44}$$

$$x_2^{(k+1)} =(1-\omega)x_2^{(k)} + \omega\frac{b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - \displaystyle\sum_{j=3}^{n} a_{2j}x_j^{(k)}}{a_{22}} \tag{45}$$

$$\vdots \tag{46}$$

$$x_i^{(k+1)} =(1-\omega)x_i^{(k)} + \omega\frac{b_i - \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}}{a_{ii}} \tag{47}$$

とします。右辺の第二項は Gauss-Seidel 法での表式と全く同じですが、含まれている $x_i^{(k+1)}$ は SOR 法で決めたものを用います。加速パラメター ω は $0 < \omega < 2$ の範囲のものである必要があります。収束を加速させるには $1 < \omega < 2$ の範囲で最適な値を選ぶ必要があります。$\omega = 1$ のときは Gauss-Seidel 法と一致しますし、$\omega < 1$ の場合は Gauss-Seidel 法より収束は遅くなりますが、挙動が安定するため、Gauss-Seidel 法で解けない問題も解ける可能性があります。

3　演習問題

連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} 5 & -1 & 1 & 2 \\ 1 & 4 & 2 & 1 \\ -2 & 1 & -6 & 2 \\ 1 & -1 & 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 \\ -9 \\ 14 \\ 4 \end{pmatrix}$$

を考える。

(30)　Gauss 消去法でこの連立一次方程式を解け。

(31)　Gauss-Jordan 消去法でこの連立一次方程式を解け。

(32)　Jacobi 法 (反復法) でこの連立一次方程式を解け。

(33)　Gauss-Seidel 法/SOR 法 (反復法) でこの連立一次方程式を解け。