卒業論文要旨

バンデルモンド型連立１次方程式に対する数値解法の精度について

(応用数学)　　大西　康幸

1. はじめに

自然科学や工学の分野において，頻繁に解かれる数値的な問題の１つとして連立１次方程式の求解問題がある．具体的には，連立１次方程式の求解問題は，現象を模式化した非線形システムや偏微分方程式，最適化問題などを数値的に解析する際に現れる．

既知な $\{a_{i,j}\}_{i=1,2,\ldots,m,j=1,2,\ldots,n}$ および $\{b_i\}_{i=1,2,\ldots,m}$ に対して，連立１次方程式は，n 個の未知数 $\{x_i\}_{i=1,2,\ldots,n}$ に関する m 本の１次方程式

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \cdots + a_{1,n}x_n = b_1, \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \cdots + a_{2,n}x_n = b_2, \\ \quad \vdots \\ a_{m,1}x_1 + a_{m,2}x_2 + \cdots + a_{m,n}x_n = b_m. \end{cases} \tag{1}$$

として定義される．連立１次方程式 (1) はまた，行列とベクトルを使って，

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \cdots & a_{m,n} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

と記述できる．このとき，A を係数行列，$\boldsymbol{x}$ を解ベクトル，$\boldsymbol{b}$ を右辺ベクトルと呼ぶ．

連立１次方程式 (1) を解くための最も簡素な考え方は，ある１つの方程式において１つの変数を他の変数の線形結合で表し，それを他の方程式に代入して変数の数を減らすというものである．しかし，どの変数から減らすべきか一意的に定まらず，計算機で求める際には一般的に大きな数値誤差を含むことは避けられない．また，係数行列 A が正則行列ならば逆行列 A^{-1} を求めて $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$ のように解ベクトルが得られるが，計算機上で精度よく A^{-1} を求めるのは困難である．20 世紀初頭から実に多くの数値解析の研究者たちが連立１次方程式の研究に従事してきたが，未だ汎用的に使用できる数値解析は確立されていない．

本研究では，数値解法が苦手な代表例の１つであるバンデルモンド行列

$$V(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_1^n & \alpha_2^n & \cdots & \alpha_n^n \end{pmatrix} \tag{2}$$

を係数行列にもつ場合に対して，数値解法の精度面での限界を明らかにする．簡素化のため，以降バンデルモンド行列 (2) を係数行列とする連立１次方程式を，バンデルモンド型連立１次方程式と呼ぶことにする．様々ある連立１次方程式の数値解法のうち，有名なガウスの消去法，ヤコビ法，ガウス・ザイデル法，SOR 法 [1]，および，バンデルモンド行列を係数にもつ場合に特化した解法とその改良型 [2] の合計 6 つについて調べる．

2．数値解法の特徴

連立１次方程式の数値解法は，直接解法と反復解法の 2 種類に分類される．

直接解法は，連立１次方程式の解が有限回の演算で求まる解法である．ガウスの消去法と [2] で示された 2 つの数値解法が直接解法に属する．係数行列が $n \times n$ 行列ならば直接解法の演算量は $O(n^3)$

なので，n が大きくなると直接解法の実行時間は著しく長くなる．また，計算機上で実行する場合は丸め誤差と桁落ちの影響を受けやすい解法である．反面，実行時間および精度を気にしなければ，必ず解を得られるという利点もある．

反復解法は，初期ベクトルを適当に定め，そのベクトルを繰り返し更新し，連立 1 次方程式の解に近づける解法である．反復解法には，ヤコビ法，ガウス・ザイデル法，SOR 法が属する．ベクトル更新を無限回繰り返すと理論上は連立 1 次方程式の解となるが，実用上は有限回で停止させて近似解を求める．$k-1$ 回目，k 回目のベクトル更新でそれぞれ $\boldsymbol{x}_{k-1}$，$\boldsymbol{x}_k$ が得られたとすると，適当な eps に対して $|\|\boldsymbol{x}_{k-1}\|_1 - \|\boldsymbol{x}_k\|_1| < eps$ が満たされた段階で停止させる．eps を小さく設定すればベクトルの更新回数は増えるが，精度のよい近似解が求まる可能性が高くなる．一般的に，直接解法よりも高速に精度よく解を求めることができるが，いつまでも停止条件が満たされないこともある．

3. 数値実験結果

本節では，バンデルモンド型連立 1 次方程式の求解に対し，6 つの数値解法を利用した場合の結果について述べる．バンデルモンド行列 (2) の α_i を変化させて 3 種類の連立 1 次方程式を用意した．右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ はいずれも $b_i = 1/2^i, i = 1, 2, \ldots, n$ とした．数値解法の精度の指標として数値解法で得られる解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ に対して，$\tilde{\boldsymbol{x}}$ の相対誤差 $r = \|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|_\infty / \|\boldsymbol{b}\|_\infty$ を考えた．反復解法において停止条件を $eps = 1.0 \times 10^{-3}$，停止までに要する反復回数を M とした．SOR 法特有のパラメータは標準的な $\omega = 1.9$ とした．バンデルモンド行列の行列サイズを $n = 2, 3, \ldots$ と増加させ，初めて $r > 1$ となる n とそのときの反復回数 M を以下の表に示す．

		係数行列の成分 α_i		
		$1.0/(i+3.0)$	$1.0+(i\times 0.1)$	$1.0-(i\times 0.1)$
直接解法	ガウスの消去法	$n = 19$	$n = 16$	$n = 48$
	特化した解法	$n = 16$	$n = 16$	$n = 52$
	改良型	$n = 16$	$n = 17$	$n = 53$
反復解法	ヤコビ法	収束しない ※	収束しない ※	収束しない ※
	ガウス・ザイデル法	収束しない ※	$n = 12$ $M = 22,070,577$	収束しない ※
	SOR 法	収束しない ※	$n = 13$ $M = 94,304,703$	収束しない ※

※ 収束しないとは，$M = 1.0 \times 10^8$ でも停止条件が満たされないことを意味する．

4. まとめと今後の課題

連立 1 次方程式の数値解法として一般的には反復解法が有用とされているが，バンデルモンド型連立 1 次方程式の求解に関しては，反復解法はほとんど使いものにならず直接解法を利用すべきという結論が得られた．また，3 つの直接解法の中では，わずかながらバンデルモンド型に特化した改良型が優れた数値解法といえる．しかしながら，直接解法が適用できる行列サイズはまだまだ小さいため，より大きな行列サイズに対しても有効な直接解法を導く必要がある．また，反復解法にも改良の余地が残されていると考える．

参考文献

[1] Å. Björck and V. Pereyra, Solution of Vandermonde systems of equations, *Math. Comp.*, **24** (1970), 893–903.

[2] G. Sewell, *Computational Methods of Linear Algebra*, Wiley, New Jersey, 2005.