4　行列の反転

前回までは常微分方程式を解いて粒子の運動を調べてきたが、次に取り組む問題は、Laplace 方程式の境界値問題を解くことである。ラプラス方程式は、定常状態の熱伝導方程式の解や電極にかこまれた真空中の静電場の問題、重力場を求める問題など、物理にしばしば現れる方程式である。

今回はその準備として、巨大な連立一次方程式を数値的に解く方法（行列反転と等価）について学ぶ。連立一次方程式を解く作業は多くの計算物理に現れる作業で、きわめて重要である。

4.1　連立一次方程式

今回取り扱うのは、vector の表記では以下のような連立一次方程式である。

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

ここで $\boldsymbol{b}$ は定数を成分とする列ベクトル、$\boldsymbol{A}$ はやはり定数を成分とする行列である。この方程式は成分をあからさまに書くと、

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{2}$$

とあらわされる。数学的にこの方程式に解があるためにはまず $\det \boldsymbol{A}$ がゼロでない値を持たなければばならない。ゼロではない場合には逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ が存在し、解は $\boldsymbol{A}^{-1}$ を用いて

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{3}$$

と書くことができる。

n が小さい問題であれば、直接この逆行列の成分を計算し、解を求める方が効率的であるが、これから取り扱うような n の大きな問題では、逆行列を求めるのではなく、反復によって式 (1) を満たす $\boldsymbol{x}$ を探す方法が計算を早く進めることができる。今回は反復法を学ぶ。

4.2　ヤコビの反復法

ヤコビの反復法は最も単純な反復法である。手順は

- まず試しの値を解として $\boldsymbol{x}$ にいれ、それを $\boldsymbol{x}^{(0)}$ とする。全部ゼロとかでよい。

- 各行の方程式を x_k に関して解く。このとき、他の x_i はすべて最初の試行の値 $x_i^{(0)}$ である。すなわち

$$
\begin{aligned}
x_1^{(1)} = &\quad a_{11}{}^{-1}\left\{b_1 - \left(\qquad\qquad +a_{12}x_2^{(0)} \cdots + a_{1k}x_k^{(0)} \cdots + a_{1n-1}x_{n-1}^{(0)} + a_{1n}x_n^{(0)}\right)\right\} \\
\vdots & \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
x_k^{(1)} = &\quad a_{kk}{}^{-1}\left\{b_k - \left(a_{k1}x_1^{(0)} + a_{k2}x_2^{(0)} \cdots \qquad\qquad \cdots + a_{kn-1}x_{n-1}^{(0)} + a_{kn}x_n^{(0)}\right)\right\} \\
\vdots & \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
x_n^{(1)} = &\quad a_{nn}{}^{-1}\left\{b_n - \left(a_{n1}x_1^{(0)} + a_{n2}x_2^{(0)} \cdots + a_{nk}x_k^{(0)} \cdots + a_{nn-1}x_{n-1}^{(0)} \qquad\qquad \right)\right\}
\end{aligned}
\tag{4}
$$

- 前のステップで求まった $x_k^{(1)}$ を用いて同じことをすると $x_k^{(2)}$ が求まる。これをどんどん繰り返して $x_k^{(i)}$ を計算していく。
- $x_k^{(i)}$ と $x_k^{(i+1)}$ があらかじめ設定した誤差の範囲内に収まったら、繰り返しのループを抜け、その値を答えとする。

次に実際のプログラムを見てみる。→トップページから。プログラムは以下の 3 変数の連立 1 次方程式を解くコードになっている。

$$
\begin{bmatrix} 6 \\ 8 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & -4 \\ 1 & -4 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \tag{5}
$$

4.3 ヤコビ法の収束条件

反復法ではいつも必ず解が求まるわけではない。問題によっては答えが収束せず、発散していく場合がある。今回の例のプログラムではうまく解けるが、たとえば

$$
\begin{bmatrix} 6 \\ 8 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & -4 \\ \mathbf{10} & -4 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \tag{6}
$$

とすると、すでに解けなくなる。ヤコビ法が（実はこのあとのガウス－ザイデル法も）収束するための十分条件が知られており、

$$
|a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}| \tag{7}
$$

であれば必ず収束する（十分条件なのでこうでなければ収束しないというわけではなく、これに近いものは収束する場合が多い）。この条件は対角要素が非対角要素よりも大きいという意味で、対角優位な行列、という言い方をする。物理の問題では多くはこの条件を満たすものが多い。

4.4　ガウス-ザイデル法

ガウスーザイデル法はヤコビの反復法を少し賢くし、解の収束を早めた方法である。以下に手順を示す。

- まず試しの値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を設定する。
- 各行の方程式をまず x_1 に関して解く。このとき、他の x_i はすべて最初の試行の値 $x_i^{(0)}$ である。ヤコビ法との違いは x_1 の次の x_2 に関して解く時に、$x_1^{(0)}$ ではなく、すぐ前に計算した $x_1^{(1)}$ を用いることである。つまり $x_k^{(1)}$ を計算するときには $j<k$ である j に対しては $x_j^{(1)}$ を使っていくことによって収束を早めるのである。すなわち

$$\begin{aligned}
x_1^{(1)} = &\ {a_{11}}^{-1}\left\{b_1 - \left(\qquad +a_{12}x_2^{(0)}\cdots + a_{1k}x_k^{(0)}\cdots + a_{1n-1}x_{n-1}^{(0)} + a_{1n}x_n^{(0)}\right)\right\} \\
\vdots \qquad & \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
x_k^{(1)} = &\ {a_{kk}}^{-1}\left\{b_k - \left(a_{k1}x_1^{(1)} + a_{k2}x_2^{(1)}\cdots \qquad \cdots + a_{kn-1}x_{n-1}^{(0)} + a_{kn}x_n^{(0)}\right)\right\} \\
\vdots \qquad & \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
x_n^{(1)} = &\ {a_{nn}}^{-1}\left\{b_n - \left(a_{n1}x_1^{(1)} + a_{n2}x_2^{(1)}\cdots + a_{nk}x_k^{(1)}\cdots + a_{nn-1}x_{n-1}^{(1)} \qquad \right)\right\}
\end{aligned} \tag{8}$$

- 前のステップで求まった $x_k^{(1)}$ を用いて同じことをすると $x_k^{(2)}$ が求まる。これをどんどん繰り返して $x_k^{(i)}$ を計算していく。ここもヤコビ法と同じ。
- $x_k^{(i)}$ と $x_k^{(i+1)}$ があらかじめ設定した誤差の範囲内に収まったら、繰り返しのループを抜け、その値を答えとする。ここもヤコビ法と同じ。

(課題でガウスーザイデル法のコードを作ってみよう。)

4.5　提出課題

1. ガウスーザイデル法のプログラムはヤコビ法のコードをほんのわずかに変えるだけでできる。どこを変更すればよいであろうか。
2. 以下の連立一次方程式をヤコビ法とガウスーザイデル法で解き、答えを示すと同時に、それぞれかかった繰り返し処理の回数を調べよ。

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} \tag{9}$$