

数値計算法の教科内容 (連立1次方程式の場合)

神戸市立工業高専 正会員 ○嵯峨 晃
関西大学工学部 正会員 三上 市蔵

1. まえがき

最近、大学・高専における情報処理教育の必要性が認識され、施設・設備およびカリキュラムの整備が着々となされている。しかし、教科内容については講義担当者毎に検討し、テーマを選択しており、誤行錯誤が繰り返されているようである。現在その方面の教科書および参考書は多数出版されている。これらを取り上げている内容を調査することによって多くの専門家の考えを統合したものととしての教科内容のプログラムを作成できるであろう。

この観点から数値計算法を取り上げ、その教科内容を決定するため、わが国で出版されている教科書・参考書を中心に調査した。今回は連立1次方程式の解法について、統計的に整理した結果を報告する。

2. 連立1次方程式の解法

調査に先立って連立1次方程式の解法を明確に分類する必要があるが、これはさきゆゑの困難な問題である。連立1次方程式に關する研究はさきゆゑ多く、1953年の G. E. Forsythe の調査によつてその文献数に400を越えている。¹⁾ その後も特に大次元の連立1次方程式の解法を中心として多くの研究がなされている。ここでは J. R. Westlake の分類²⁾を若干修正して用いた。すなわち、大分類として直接法と反復法とに分け、小分類としては直接法を18、反復法を17の合計35の解法に分類した。

調査の対象とした教科書・参考書は1979年3月末までにわが国で出版されたものの51冊から特殊なテーマについてのみ記されているものを除いた45冊(うち訳本15冊)である。そのうち20冊は明確にコンピュータ・プログラミングを意識して書かれている。

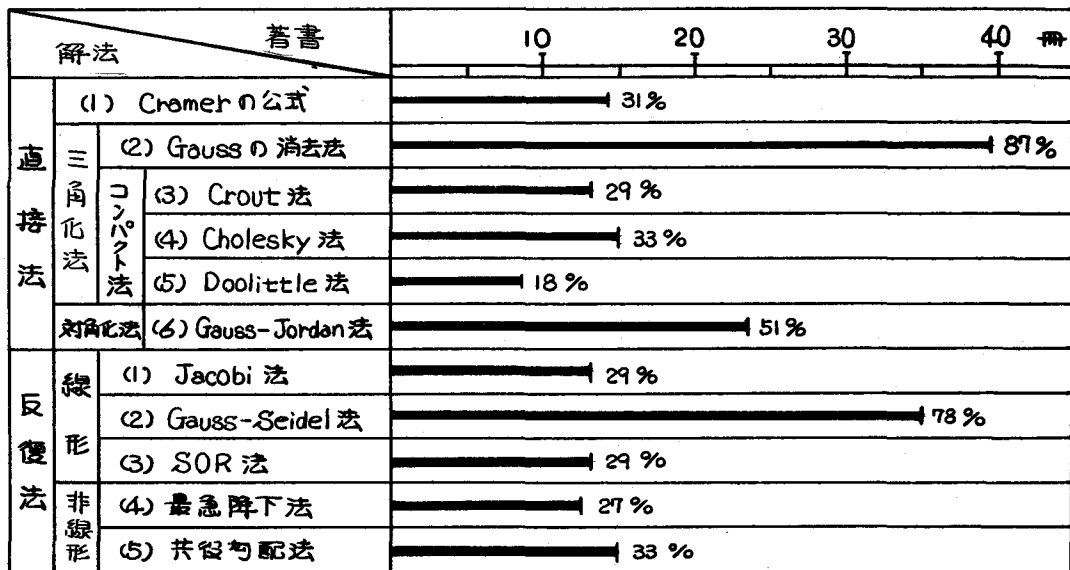


図 - 1

5の解法について取り上げられている教科書および参考書の冊数を調べた結果は図-1のようになった。直接法は解法のうち図-1に示した6解法が主として取り上げられており、その他の解法については1~2の教科書が取り上げている場合もあるが、ほとんど取り上げられていないと考えてよい。反復法については17解法のうち図-1に示した5解法のみが取り上げられており、他の解法はほとんど取り上げられていない。この結果から数値計算法に関する教科書または参考書においては対象とする解法は明確に限定されていることがわかる。

3. 連立1次方程式の解法の選択

ここには調査結果を分析し、希望する連立1次方程式の教科内容について考えてみる。

1) Cramerの公式 図-1に見られるようにCramerの公式は31%の著書を取り上げられている。この解法は行列式の計算に基礎をおいており、数学的にはすぐれた解法である。しかし、行列式の計算を最も能率的に行なったとしても演算回数が多く、実用的ではない。したがって、数値解析法としての教科内容から省くべきとする。

2) 三角化法 Gaussの消去法は三角化法の一形態であって、演算回数の点から最もすぐれた方法といわれている。^{1), 2)}事実、図-1からわかるように最も広く取り上げられている。

三角化法に属するが、三角分解法とも呼ぶべきコンパクト法は約1/4の著書を取り上げられている。Crout法とDoolittle法は三角分解のアルゴリズムに若干差があるのみ基本的には同一の解法である。表-1に示す通りCroutのみを取り上げているのが4冊、Doolittle法の

表-1

組み合わせ コンパクト法	A	B	C
Crout 法	○	△	○
Doolittle 法	△	○	○
取り上げられている著書	6	1	7

のみを取り上げているのが1冊、両解法にふれているのが7冊あり、なんらかの形コンパクト法にふれているのは15冊である。この方法の特徴は右辺が複数組ある場合にはマトリックス分解は一度でよく、別の右辺に対してはマトリックス積の計算のみを解け得られる点にある。Gaussの消去法が右辺が複数組ある場合には行列があるのに対して、コンパクト法はとって強調されている。その意味からGaussの消去法にふれずに、Crout法にふれている著書は1冊ある。最近、三角分解がGaussの消去法のアルゴリズムを可能なことばかり²⁾、Crout法・Doolittle法などというところをせざるに、一つの三角分解法としての形を講義されるのを見たい。コンパクト法の中Cholesky法は33%の著書を取り上げられているが、マトリックスが対称であることの特徴を考慮した解法としてこの方法のみが取り上げられていることになる。

3) Gauss-Jordan法 三角化法に対する対角化法とも呼ぶべきGauss-Jordan法はGaussの消去法と並んで広く用いられてきた解法である。しかし、演算回数はGaussの消去法は $n^3/3$ であるのに対して、Gauss-Jordan法は $n^3/2$ となり、ほとんどGauss-Jordan法が講義されなければならない理由はない。ただし、Gaussの消去法のように前進消去と後退代入という異なった2つのアルゴリズムから成り立つのではなく、Gauss-Jordan法は単一のアルゴリズムで解け得られるのが分かり易い。また、逆マトリックスを求める方法として上記の種々の解法をそのまま利用できるが、プログラミングの点からはGauss-Jordan法の方が簡潔で有利である。

しかし、逆マトリックスの要素をどのよう求める必要の無い限り、三角分解法を用いれば、逆マトリックスを用いて求めるほとんどすべては少ない演算回数でできる。²⁾その意味からGauss-Jordan法は取り上げる必要はない。コンピュータ・メカを提供する数値計算ライブラリーの最新版においてはGaussの消去法に序を譲り、Gauss-Jordan法は後とされることが多い。

今回の調査によれば45冊中15冊(33%)の著書が逆マトリックスについてふれている。別の目的を持つ場合は別として、連立1次方程式の1解法としてはふれる必要はないのではないが。

4) 反復法 反復法としては17の解法に分類して調査したが、図-1のごとく必ず5解法が取り上げられているのみである。反復法は線形反復法と非線形反復法に分けられるが、線形反復法としては78%の著書が Gauss-Seidel法を取り上げている。そのつぎに多く取り上げられているのが Jacobi法とSOR法である。

Jacobi法とSOR法を取り上げている著書は必ず Gauss-Seidel法が取り上げられている。したがって Gauss-Seidel法を取り上げたのち、Jacobi法かSOR法を取り上げると3冊が内題となる。表-2に示す通り Gauss-Seidel法とJacobi法を取り上げている著書は5冊、Gauss-Seidel法とSOR法を取り上げている著書は5冊、3解法とも取り上げられている著書は8冊で、Gauss-Seidel法のみ取り上げられているのが17冊であるという現状である。計算のアルゴリズムから考えれば、Jacobi法とGauss-Seidel法とはつながりがあり、説明が簡潔であるが、収束性の良から Jacobi法は劣るので、Gauss-Seidel法に的を絞りさらに収束を加速する意味をSOR法にふれるのが1つのやり方である。

表-2

線形反復法	組み合わせ			
	A	B	C	D
Gauss-Seidel法	○	○	○	○
Jacobi法	○	△	○	△
SOR法	△	○	○	△
取り上げられている著書	5	5	8	17

表-3

つぎに非線形反復法として種々あるが図-1に見る通りに共役勾配法と最急降下法のみがある。その内訳は表-3に示すように、共役勾配法のみを取り上げているのが6冊、最急降下法のみを取り上げているのが3冊しかなく、両解法にふれているのが9冊である。非線形反復法として1つだけ取り上げるとすれば共役勾配法もある。

非線形反復法	組み合わせ		
	A	B	C
共役勾配法	○	△	○
最急降下法	△	○	○
取り上げられている著書	6	3	9

したがって、反復法としては Gauss-Seidel法・SOR法・共役勾配法の3つを取り上げる方法が考えられる。しかし、共役勾配法は、SOR法より収束性を高めるために非線形計算を取り入れたものであることを考えると、基本となる Gauss-Seidel法と収束を早めるための共役勾配法という2つを取り上げる方法もある。

4. その他の計算技法

連立1次方程式の解法に関する計算技法の中で重要なものについて個々に述べる。

1) ピボットティング 係数マトリックスの対角要素がゼロになる場合を避けるため、また丸めの誤差を小さくするためにピボットティングは有効であることはよく知られている。ピボットティングを取り上げている著書は調査した45冊中で24冊で、うち Gaussの消去法を取り上げている著書39冊中19冊である。Gauss-Jordan法を取り上げている著書23冊中11冊である。およそ半分の著書はピボットティングについてふれていることになる。やや少ないうちに思われる。

2) スケーリング ピボットティングのみをもたぬ効果を発揮するが、ピボットティングを行なう場合、スケーリングを併用すると必ずしうことよく知られている。スケーリングについてふれている著書は調査した45冊中必ずしも10冊である。うち Gaussの消去法を取り上げている著書39冊中9冊、Gauss-Jordan法を取り上げている著書23冊中4冊のみがスケーリングについて述べられている。およそピボットティングについてふれている著書の1/2程度である。構造解析など通常解かれる連立1次方程式に対してはスケーリングの必要性はあまりないところでは、行および列に対する完全なスケーリングをなくして、行のスケーリングをすくなくともおく必要がある。

3) 高精度計算 マトリックスの性質が悪い場合に高精度計算の必要となる場合がある。高精度計算についてふられている書籍は調査した45冊中たった2冊である。しかし、数値計算誤差については45冊中12冊(27%)の書籍がふられている。最近のコンピュータのコパイラは自動的に高精度計算処理ができるようになってきていることを考えるとあきりふれる必要となるであろう。しかし数値計算誤差についてはふれる必要もある。

4) ベクトルのノルム 連立1次方程式の解法における丸め差の解析に非常に有効である。特に反復法の場合の収束の判定に欠すことなきなり。調査した45冊中15冊(33%)の書籍に述べられている。

5) 大次元連立1次方程式の解法 最近、有限要素法を始めとして多くの分野で大次元の連立1次方程式が解かれることが多くなった。コンピュータの記憶容量・計算時間および解の精度が問題になる。大次元である場合の解法にふれている書籍は調査した45冊中8冊で、うちスパースマトリックスやウエブフロント法を取り上げているのが4冊、帯マトリックスにふれているのが2冊である。現在30%程度の書籍しかふれていないことばかりだったが、コンピュータの利用が高まっていく将来を考えると、基礎的な知識のみを与える必要もあると思われる。

参考文献

- 1) Westlake, J.R.: A Handbook of Numerical Matrix Inversion and Solution of Linear Equations, John Wiley & Sons, New York, 1968. (戸川年人訳: コンピュータのための線形ハンドブック, 培風館, 1972)
- 2) Forsythe, G.E. and Moler, C.B.: Computer Solution of Linear Algebraic Systems, Prentice-Hall, 1967. (渋谷政治・田辺国士訳: 計算機のための線形計算の基礎—連立1次方程式のプログラミング—, 培風館, 1969.)
- 3) 牧えい三郎, 島呂達生: 数値解析, 工一社, 1975.
- 4) T. R. マッカーラ(三浦 功/田尾陽一 共訳): 計算機のための数値計算法概論, サイエンス社, 1972.
- 5) 土木学会編: 土木工学における数値解析/基礎編, サイエンス社, 1974.
- 6) 一松 信: 数値計算, 至文堂, 1963.
- 7) B. ウェンドロフ(戸川年人訳): 理論数値解析, サイエンス社, 1973.
- 8) 一松 信: 数値解析, 応用数理協会, 1971.
- 9) 森 正武: 数値解析, 共立出版, 1973. 「1978.
- 10) G.E. Forsythe/M.A. Malcolm/C.B. Moler (森 正武 訳): 計算機のための数値計算法, 科学技術出版,
- 11) 平野/戸川/藤井/三好: 計算技術および数値計算法, 培風館, 1971.
- 12) F. ジョン(藤田宏, 名取亮 訳): 数値解析講義, 産業図書, 1975.
- 13) 篠崎 壽夫・松下祐輔 編: エキのための応用数値計算法入門(上), コロナ社, 1976.
- 14) 両宮健夫, 田口武夫 編: 数値解析とFORTRAN, 丸善, 1969
- 15) 洲之内 治男: 数値計算, サイエンス社, 1978.
- 16) J. ウォルシュ(高須達男訳), 数値解析概論, 日本評論社, 1970.
- 17) 山本哲朗: 数値解析入門, サイエンス社, 1976.
- 18) 森下 信: 初等数値解析, 森北出版, 1977.
- 19) J.M. マコーミク/M.G. サルバドリ(清水留三郎): FORTRANによる数値計算プログラム, サイエンス社, 1970.
- 20) 一松 信: 電子計算機と数値計算, 朝倉書店, 1973.
- 21) 中野 利雄: 計算機のための数値計算, 朝倉書店, 1962.
- 22) D.G. モースト/C.S. デュリス(村上豊夫訳): 初等数値解析, 共立出版, 1975.
- 23) 新谷尚義: 数値計算I—線形計算—, 朝倉書店, 1967.