

連立1次方程式3

山浦 剛 (tyamaura@riken.jp)

講義資料ページ

- http://climate.aics.riken.jp/members/yamaura/numerical_analysis.html

反復法による連立1次方程式の解1

- 反復によって解を求める、直接法(ガウスの消去法、LU分解)とは全く異なる解法。
 - 連立1次方程式の形によっては、直接法よりも簡単に解くことができる。
- 次のような2元連立1次方程式の解を考える。
 - $$\begin{cases} 5x_1 + 4x_2 = 13 \\ 2x_1 + 3x_2 = 8 \end{cases}$$
- 上の式を変形すると、
 - $$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{5}(13 - 4x_2) \\ x_2 = \frac{1}{3}(8 - 2x_1) \end{cases}$$

反復法による連立1次方程式の解2

- 変形した連立1次方程式から、新しく漸化式を作る。

- $$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{5}(13 - 4x_2^{(k)}) = f_1(x_2^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{3}(8 - 2x_1^{(k)}) = f_2(x_1^{(k)}) \end{cases}$$

- 適当な $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}$ を決め、 k について反復して解くことができる。
 - $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = 0$ として、実際に反復法で解いたのが右表。
 - 真の解は、 $x_1 = 1, x_2 = 2$
- 漸化式によって解の近似値を求める解法を**反復法**といい、上の反復法は特に**ヤコビ法**と呼ばれる。

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$
0	0	0
1	2.60000000	2.66666667
2	0.46666667	0.93333333
3	1.85333333	2.35555556
4	0.71555556	1.43111111
⋮	⋮	⋮
38	0.99999350	1.999987
39	1.00001040	2.00000433
40	0.99999653	1.99999307
41	1.00000555	2.00000231

解への収束1

- 任意の初期値から始めて、反復法は必ず解に収束することが保証されるのか？
 - 解に収束しないようであれば、反復法を使うことはできない。

- 先ほどの漸化式を次のように書き換える。

- $$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{4}{5} \\ -\frac{2}{3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{13}{5} \\ \frac{8}{3} \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{4}{5} \\ -\frac{2}{3} & 0 \end{pmatrix} \text{ とおく}$$

- この連立1次方程式の解 $(x_1, x_2) = (1, 2)$ は上の式を満足するので、

- $$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{13}{5} \\ \frac{8}{3} \end{pmatrix}$$

解への収束2

- 両式の差をとると、

- $$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} - 1 \\ x_2^{(k+1)} - 2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix}$$

- これは、左辺と右辺がそれぞれk+1回目とk回目の反復値と真の解との誤差を表している。

- この式は反復値の誤差の漸化式となっている。即ち、k回目の誤差に行列Mを左からかけるとk+1回目の誤差となる。

- 初期値の誤差に対し、行列Mをk回乗算するとk回目の誤差になるので、

- $$\begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} x_1^{(0)} - 1 \\ x_2^{(0)} - 2 \end{pmatrix}$$

- この式が何を意味するのか？

- k回目の誤差ベクトル(左辺)は、初期値の誤差ベクトル(右辺)に行列Mによる変換をk回行った結果に等しい。

- 行列Mによる変換により、 $k \rightarrow \infty$ で誤差ベクトルの大きさがゼロに近づくのであれば、解に収束することを示す。

解への収束3

- 「行列Mによる変換によって誤差ベクトルの大きさがゼロに近づく」ことを示すには？
 - 「行列Mによる変換」が誤差ベクトルの大きさを小さくする方向に働くことを示せばよい。
- 行列Mによる変換を、**固有値**、**固有ベクトル**を用いて表す。
 - $M\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ (λ は任意定数、 \mathbf{v} は非零のベクトル)
 - λ と \mathbf{v} をそれぞれ行列Mに対する固有値、固有ベクトルと呼ぶ。
 - 固有ベクトルに対する行列Mによる変換は、固有ベクトルを定数倍(固有値の倍数)する操作に等しい。
- これを変形すると、
 - $(M - \lambda I)\mathbf{v} = \mathbf{0}$ (I : 単位行列)
- ここで \mathbf{v} が非零となるには、 $(M - \lambda I)$ の行列式 $\det(M - \lambda I) = 0$ (**固有方程式**)である。
 - $\det(M - \lambda I) \neq 0$ であれば、 $(M - \lambda I)$ は正則行列(逆行列をもつ行列)となる。
 - よって、 $(M - \lambda I)^{-1}(M - \lambda I)\mathbf{v} = (M - \lambda I)^{-1}\mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{v} = \mathbf{0}$ でなければならない。

解への収束4

- 固有方程式より、行列Mの固有値 λ は、

➤ $\det \begin{pmatrix} -\lambda & -\frac{4}{5} \\ -\frac{2}{3} & -\lambda \end{pmatrix} = 0, \quad \left(\lambda^2 - \frac{8}{15}\right) = 0, \quad \lambda = \pm \sqrt{\frac{8}{15}}$

- この固有値に対応する固有ベクトルは、

➤ $\lambda = \lambda_1 = \sqrt{\frac{8}{15}}: \left\{ \begin{pmatrix} 0 & -\frac{4}{5} \\ -\frac{2}{3} & 0 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{8}{15}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{8}{15}} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{2}{3} & -\sqrt{\frac{8}{15}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{6} \\ -\sqrt{5} \end{pmatrix}$

➤ $\lambda = \lambda_2 = -\sqrt{\frac{8}{15}}: \left\{ \begin{pmatrix} 0 & -\frac{4}{5} \\ -\frac{2}{3} & 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{8}{15}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{8}{15}} & -\frac{4}{5} \\ -\frac{2}{3} & \sqrt{\frac{8}{15}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{6} \\ \sqrt{5} \end{pmatrix}$

解への収束5

- 初期値の誤差ベクトルを、固有ベクトルの重ね合わせで表現する。

- $$\begin{pmatrix} x_1^{(0)} - 1 \\ x_2^{(0)} - 2 \end{pmatrix} = c_1 \mathbf{e}_1 + c_2 \mathbf{e}_2 \quad (c_1, c_2 \text{ は任意定数})$$

- よって元々の誤差ベクトルの式は、次のように書ける。

- $$\begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} = M^k (c_1 \mathbf{e}_1 + c_2 \mathbf{e}_2) = c_1 M^k \mathbf{e}_1 + c_2 M^k \mathbf{e}_2 = c_1 \lambda_1^k \mathbf{e}_1 + c_2 \lambda_2^k \mathbf{e}_2 \quad (M\mathbf{e}_1 = \lambda_1 \mathbf{e}_1, M\mathbf{e}_2 = \lambda_2 \mathbf{e}_2)$$

- ここで、 $|\lambda_1| < 1, |\lambda_2| < 1$ なので、 $k \rightarrow \infty$ で $\lambda_1^k = \lambda_2^k = 0$ となる。よって、

- $$\lim_{k \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

- これは任意の初期値から始めた場合でも、反復法の誤差はゼロに収束することを示す。

- 解に収束するための条件は、**行列Mの固有値の絶対値が全て1より小さい**こと。

ガウス-ザイデル法

- ヤコビ法の漸化式を少し修正。

- $$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{5}(13 - 4x_2^{(k)}) = f_1(x_2^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{3}(8 - 2x_1^{(k+1)}) = f_2(x_1^{(k+1)}) \end{cases}$$

- これは第1式で $x_1^{(k)}$ より解に近い $x_1^{(k+1)}$ が得られるので、第2式で直ちにそれを用いる。この反復法を**ガウス-ザイデル法**という。

- ガウス-ザイデル法は順序よく計算する必要がある。また、 $x_1^{(0)}$ は不必要。

- ガウス-ザイデル法は、ヤコビ法よりも早く収束する。

- ヤコビ法: $x_1^{(k+2)} = f_1(x_2^{(k+1)}) = f_1(f_2(x_1^{(k)}))$

- ガウス-ザイデル法: $x_1^{(k+1)} = f_1(x_2^{(k)}) = f_1(f_2(x_1^{(k)}))$

- ヤコビ法では2ステップかかる計算が、ガウス-ザイデル法では1ステップで済む。

- 2元連立1次方程式の場合、2倍速いことを示す。

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$
0		0
1	2.60000000	0.93333333
2	1.85333333	1.43111111
3	1.45511111	1.69659259
4	1.24272593	1.83818272
5	1.12945383	1.91369745
⋮	⋮	⋮
19	1.00001950	1.99998700
20	1.00001040	1.99999307
21	1.00000555	1.99999630

逐次過緩和(SOR)法

- **SOR法**は、ガウス-ザイデル法の漸化式を、さらに修正。
 - $$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{\omega}{5}(13 - 4x_2^{(k)}) + (1 - \omega)x_1^{(k)} = \omega f_1(x_2^{(k)}) + (1 - \omega)x_1^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{\omega}{3}(8 - 2x_1^{(k+1)}) + (1 - \omega)x_2^{(k)} = \omega f_2(x_1^{(k+1)}) + (1 - \omega)x_2^{(k)} \end{cases}$$
- $\omega, x_1^{(0)}, x_2^{(0)}$ が決まれば、 $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \dots$ という順で値が定まる。 $\omega = 1$ のとき、ガウス-ザイデル法に一致する。この ω を**加速係数**という。
- 式変形により、
 - $$\begin{cases} x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)} = \omega \{f_1(x_2^{(k)}) - x_1^{(k)}\} \\ x_2^{(k+1)} - x_2^{(k)} = \omega \{f_2(x_1^{(k+1)}) - x_2^{(k)}\} \end{cases}$$
- SOR法は、ガウス-ザイデル法の誤差の変化量に加速係数をかけ、誤差の変化を“加速”させているようなもの。

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$
0	0	0
1	3.12000000	0.70400000
2	1.82016000	1.60307200
3	1.21701888	1.90577050
4	1.04705655	1.98120066
5	1.00863605	1.99685102
⋮	⋮	⋮
11	0.99999943	2.00000024
12	0.99999988	2.00000005
13	0.99999998	2.00000001

$\omega = 1.2$ の場合

一般係数行列のヤコビ法

- 一般係数行列で表現される連立1次方程式は次の通り。

➤
$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

- ヤコビ法で漸化式を作る。

➤
$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{1,1}} \left\{ y_1 - \left(a_{1,2}x_2^{(k)} + a_{1,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{1,N}x_N^{(k)} \right) \right\} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{2,2}} \left\{ y_2 - \left(a_{2,1}x_1^{(k)} + a_{2,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2,N}x_N^{(k)} \right) \right\} \\ \vdots \\ x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left\{ y_i - \left(a_{i,1}x_1^{(k)} + a_{i,2}x_2^{(k)} + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \cdots + a_{i,N}x_N^{(k)} \right) \right\} \\ \vdots \\ x_N^{(k+1)} = \frac{1}{a_{N,N}} \left\{ y_N - \left(a_{N,1}x_1^{(k)} + a_{N,2}x_2^{(k)} + \cdots + a_{N,N-1}x_{N-1}^{(k)} \right) \right\} \end{cases}$$

一般係数行列のガウス-ザイデル法

- ガウス-ザイデル法で漸化式を作る。

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{1,1}} \left\{ y_1 - \left(a_{1,2}x_2^{(k)} + a_{1,3}x_3^{(k)} + \dots + a_{1,N}x_N^{(k)} \right) \right\} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{2,2}} \left\{ y_2 - \left(a_{2,1}x_1^{(k+1)} + a_{2,3}x_3^{(k)} + \dots + a_{2,N}x_N^{(k)} \right) \right\} \\ \vdots \\ x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left\{ y_i - \left(a_{i,1}x_1^{(k+1)} + a_{i,2}x_2^{(k+1)} + \dots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \dots + a_{i,N}x_N^{(k)} \right) \right\} \\ \vdots \\ x_N^{(k+1)} = \frac{1}{a_{N,N}} \left\{ y_N - \left(a_{N,1}x_1^{(k+1)} + a_{N,2}x_2^{(k+1)} + \dots + a_{N,N-1}x_{N-1}^{(k+1)} \right) \right\} \end{cases}$$

- $x_i^{(k+1)}$ を計算する場合、 $a_{i,i-1}$ の項までは $x_{i-1}^{(k+1)}$ が計算できているはずなので、 $k+1$ の値を用いて計算していく。

一般係数行列のSOR法

- SOR法で漸化式を作る。

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{\omega}{a_{1,1}} \left\{ y_1 - \left(a_{1,2}x_2^{(k)} + a_{1,3}x_3^{(k)} + \dots + a_{1,N}x_N^{(k)} \right) \right\} + (1-\omega)x_1^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{\omega}{a_{2,2}} \left\{ y_2 - \left(a_{2,1}x_1^{(k+1)} + a_{2,3}x_3^{(k)} + \dots + a_{2,N}x_N^{(k)} \right) \right\} + (1-\omega)x_2^{(k)} \\ x_i^{(k+1)} = \frac{\omega}{a_{i,i}} \left\{ y_i - \left(a_{i,1}x_1^{(k+1)} + a_{i,2}x_2^{(k+1)} + \dots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \dots + a_{i,N}x_N^{(k)} \right) \right\} + (1-\omega)x_i^{(k)} \\ x_N^{(k+1)} = \frac{\omega}{a_{N,N}} \left\{ y_N - \left(a_{N,1}x_1^{(k+1)} + a_{N,2}x_2^{(k+1)} + \dots + a_{N,N-1}x_{N-1}^{(k+1)} \right) \right\} + (1-\omega)x_N^{(k)} \end{cases}$$

- $\omega = 1$ でガウス-ザイデル法と一致する。

反復法の収束判定条件

- 反復法では収束判定条件を設定しなければ、反復計算が終わらない。
 - 計算を打ち切る条件は、 $x^{(k)}$ の値が十分に真の解へ近づいたとすること。
 - $x^{(k+1)} \approx x^{(k)}$ であることを数式でどう表現するか。
- ここでは、以下の条件を収束判定条件とする。
 - $\sum_{i=1}^N \left| \frac{x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}}{x_i^{(k+1)}} \right| < \varepsilon$ (ε : 許容する誤差の大きさ)
- ベクトル要素を平均して考えた時、 $x^{(k+1)}$ と $x^{(k)}$ の差が $x^{(k+1)}$ の大きさの ε 倍未満である。
- 他にベクトル要素の最大値を用いて判断する条件もある。
 - $\frac{\max_{1 \leq i \leq N} |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}|}{\max_{1 \leq i \leq N} |x_i^{(k+1)}|} < \varepsilon$

反復法のアルゴリズム

- **ヤコビ法**: $N, a_{i,j}, y_i$, 初期値のベクトル x, ε を設定。

条件達成まで、以下

$sum := 0$

$error := 0$

$i := 1, 2, \dots, N$ の順に

$$z_i := \frac{1}{a_{i,i}} \{y_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j - \sum_{j=i+1}^N a_{i,j} x_j\}$$

$sum := sum + |z_i|$

$error := error + |z_i - x_i|$

を繰り返す

収束判定条件 ($\frac{error}{sum} < \varepsilon$) を満たせばループ終了

$i := 1, 2, \dots, N$ の順に

$x_i := z_i$

を繰り返す

を繰り返す

- ベクトル z が答えとなる。

- **SOR法**: $N, a_{i,j}, y_i$, 初期値のベクトル x, ε, ω を設定。

条件達成まで、以下

$sum := 0$

$error := 0$

$i := 1, 2, \dots, N$ の順に

$$z := \frac{\omega}{a_{i,i}} \{y_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j - \sum_{j=i+1}^N a_{i,j} x_j\} + (1 - \omega) x_i$$

$sum := sum + |z|$

$error := error + |z - x_i|$

$x_i = z$

を繰り返す

収束判定条件 ($\frac{error}{sum} < \varepsilon$) を満たせばループ終了

を繰り返す

- ベクトル x が答えとなる (中間変数はベクトルにしない)。

- $\omega = 1$ でガウス-ザイデル法と一致。

各解法の特徴と補足

➤ 解への収束(補足)

- 反復法の全ての漸化式を、 $x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + c$ (c : 定数ベクトル)と表示できる。
- 解へ収束するためには行列 M の全固有値が1未満であることだが、大規模な連立1次方程式では固有値を調べること自体が困難。反復法でうまくいかないケースもある。

➤ 加速係数 ω の決定

- 条件次第で最適な ω を決定する手法は存在するが、通常は困難。連立1次方程式を1回解くだけであれば、ガウス-ザイデル法を使うのが望ましい。また、必ず $0 < \omega < 2$ の範囲になければならない。
- ベクトル y を変更して同じ連立1次方程式を解く(陰公式の時間発展等)場合、SOR法で加速させる意味が出てくる。

➤ 直接法と反復法

- 直接法は有限回の手続きで必ず解を得られる。原理的に、可解なあらゆる連立1次方程式に適用可能。
- 反復法は適用不可能な問題がありうる。一方で、解ける問題においてメモリ使用量は非常に小さく抑えられる。

練習問題

- ガウス-ザイデル法を用いて、以下の連立1次方程式を解け。ただし、計算途中の有効数字は4桁、初期値の x_1, x_2, x_3 はゼロとし、解は反復回数を10回とした場合の結果とする。

- $$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & -2 \\ 2 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ -3 \end{pmatrix}$$

回答例1

- ガウス-ザイデル法を用いて、以下の連立1次方程式を解け。ただし、計算途中の有効数字は4桁、初期値の x_1, x_2, x_3 はゼロとし、解は反復回数を10回とした場合の結果とする。

- $$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & -2 \\ 2 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ -3 \end{pmatrix}$$

- ガウス-ザイデル法による漸化式を作る。

- $$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{3}(4 - 2x_2^{(k)} - x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{3}(6 - x_1^{(k+1)} + 2x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{4}(-3 - 2x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)}) \end{cases}$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0		0	0
1	1.333	1.556	-1.028
2	0.6387	1.102	-0.7939
3	0.8633	1.183	-0.8859
4	0.8400	1.129	-0.8878
5	0.8766	1.116	-0.9093
6	0.8924	1.096	-0.9222
7	0.9100	1.082	-0.9345
8	0.9235	1.069	-0.9445
9	0.9335	1.059	-0.9520
10	0.9445	1.051	-0.9595

後期定期試験

- 日時未定(90分)
 - 関数電卓の持ち込みを許可(必須)
- 出題範囲
 - 第7章「連立1次方程式」
 - 関連する講義ノートも含む
- 出題内容
 - 知識を問う問題
 - 数値計算プログラムに関する問題
 - 計算問題(レベルは講義中の練習問題と同等)

再試験

- 2月23日(金) 午後(90分)
 - 関数電卓の持ち込みを許可(必須)
 - 対象者は後期定期試験による判定後、通知
- 出題範囲
 - 「数値計算」第1～7章、「数値計算法入門」第3章(フーリエ級数関連の箇所)
 - 後期定期試験を含む、計4回の試験に対応する大問を4つ
- 出題内容
 - 知識を問う問題
 - 数値計算プログラムに関する問題
 - 計算問題(レベルは講義中の練習問題と同等)