山田龍

2020年11月23日

1 Gauss-Seidel 法

Gauss-Seidel 法と SOR 法の導出については [1] の導出を参考にした。

$$A = D + L + U \tag{1}$$

の順番で対角成分、下三角成分、上三角成分を定義する。解くべき連立方程式は、

$$(D+L+U)\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{2}$$

$$\mathbf{x} = -D^{-1}(L+U)\mathbf{x} + D^{-1}\mathbf{b} \tag{3}$$

ヤコビ法では、以下の漸化式が成立すれば $x^{(k)}$ は連立方程式の解である。

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = -D^{-1}L\mathbf{x}^{(k)} - D^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}$$
(4)

Gauss-Seidel 法では、以下の漸化式が成立すれば $x^{(k)}$ は連立方程式の解である。

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = -D^{-1}L\mathbf{x}^{(k+1)} - D^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}$$
(5)

$$= -D^{-1}(L+U)\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}$$
(6)

反復の計算は、

$$\begin{split} (E+D^{-1}L)\mathbf{x}^{(k+1)} &= -D^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b} \\ (D+L)D^{-1}\mathbf{x}^{(k+1)} &= -D^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b} \\ \mathbf{x}^{(k+1)} &= -(D+L)^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + (D+L)^{-1}\mathbf{b} \end{split}$$

ここで、 $\mathbf{d}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$ を定義する。

$$\begin{split} \mathbf{d}^{(k+1)} &= -\left[(D+L)^{-1}U + E \right] \mathbf{x}^{(k)} + (D+L)^{-1} \mathbf{b} \\ &= -\left[(D+L)^{-1}U - D^{-1}U + D^{-1}U + E \right] \mathbf{x}^{(k)} \\ &+ \left[(D+L)^{-1} - D^{-1} + D^{-1} \right] \mathbf{b} \\ &= -\left[-L(D+L)^{-1}D^{-1}U + D^{-1}U + E \right] \mathbf{x}^{(k)} \\ &+ \left[-L(D+L)^{-1}D^{-1} + D^{-1} \right] \mathbf{b} \\ &= -D^{-1}L\mathbf{x}^{(k+1)} - \left(D^{-1}U + E \right) \mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b} \end{split}$$

更に変形する。

$$\begin{split} (E+D^{-1}L)\mathbf{d}^{(k+1)} \\ &= -D^{-1}L(-D^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}) \\ &- \left(D^{-1}U + E\right)(-D^{-1}U\mathbf{x}^{(k-1)} + D^{-1}\mathbf{b}) \\ &+ (D^{-1} + D^{-1}LD^{-1})\mathbf{b} \\ &= -D^{-1}LD^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} - D^{-1}LD^{-1}\mathbf{b} \\ &+ \left(D^{-1}UD^{-1}U + D^{-1}U\right)\mathbf{x}^{(k-1)} \\ &- (D^{-1}UD^{-1} + D^{-1})\mathbf{b} \\ &+ (D^{-1} + D^{-1}LD^{-1})\mathbf{b} \end{split}$$

両辺変形して、

$$\begin{split} D^{-1}(D+L)\mathbf{d}^{(k+1)} &= D^{-1}[-LD^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} - LD^{-1}\mathbf{b} \\ &\quad + \left(UD^{-1}U + U\right)\mathbf{x}^{(k-1)} \\ &\quad + \left(-UD^{-1} + LD^{-1}\right)\mathbf{b}] \\ (D+L)\mathbf{d}^{(k+1)} &= -LD^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} - LD^{-1}\mathbf{b} \\ &\quad + \left(UD^{-1}U + U\right)\mathbf{x}^{(k-1)} \\ &\quad + \left(-UD^{-1} + LD^{-1}\right)\mathbf{b} \end{split}$$

左辺の係数の逆行列を両辺にかけて、

$$\mathbf{d}^{(k+1)} = (D+L)^{-1}U[-LD^{-1}\mathbf{x}^{(k)} + (D^{-1}U+E)\mathbf{x}^{(k-1)} - D^{-1}\mathbf{b}]$$
$$= (D+L)^{-1}U\mathbf{d}^{(k)}$$

よって Gauss-Seidel 法において解が収束する条件は、

$$||(D+L)^{-1}U||_2 < 1 (7)$$

反復すべき式は、

$$D\mathbf{x}^{(k+1)} = -L\mathbf{x}^{(k+1)} - U\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}$$
(8)

$$a_{ii}\mathbf{x}_{i}^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\mathbf{x}_{j}^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\mathbf{x}_{j}^{(k+1)} + \mathbf{b}_{i}$$

$$(9)$$

2 SOR 法

Gauss-Seidel 法において、緩和係数 ω を持ち込んで改良した解法を SOR 法という。Gauss-Seidel 法の計算式を変形する。

$$(E+D^{-1}L)\mathbf{x}^{(k+1)} = -D^{-1}U\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}$$
(10)

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - D^{-1}L\mathbf{x}^{(k+1)} - (D^{-1}U + E)\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}$$
(11)

SOR 法では緩和係数 ω を導入する。

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \omega \left[-D^{-1}L\mathbf{x}^{(k+1)} - (D^{-1}U + E)\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b} \right]$$
(12)

$$(E + \omega D^{-1}L)\mathbf{x}^{(k+1)} = \left[E - \omega(D^{-1}U + E)\right]\mathbf{x}^{(k)} + \omega D^{-1}\mathbf{b}$$
(13)

反復すべき式は、

$$D\mathbf{x}^{(k+1)} = D\mathbf{x}^{(k)} + \omega \left[-L\mathbf{x}^{(k+1)} - (U+D)\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b} \right]$$
(14)

$$D\mathbf{x}^{(k+1)} = -\omega L\mathbf{x}^{(k+1)} + [D - \omega(U+D)]\mathbf{x}^{(k)} + \omega\mathbf{b}$$
(15)

成分表示すれば、

$$a_{ii}\mathbf{x}_{i}^{(k+1)} = -\omega \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\mathbf{x}_{j}^{(k+1)} + (1-\omega)a_{ii}\mathbf{x}_{i}^{(k)} - \omega \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\mathbf{x}_{j}^{(k)} + \omega \mathbf{b}_{i}$$
(16)

緩和係数は問題に応じて選択される。

3 課題1

$$\begin{pmatrix} 10 & 1 & 4 & 0 \\ 1 & 10 & 5 & -1 \\ 4 & 5 & 10 & 7 \\ 0 & -1 & 7 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15 \\ 15 \\ 26 \\ 15 \end{pmatrix}$$
 (17)

$$\begin{pmatrix} 10 & 1 & 4 & 0 \\ 1 & 10 & 5 & -1 \\ 4 & 5 & 10 & 7 \\ 0 & -1 & 7 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 \\ 16 \\ 25 \\ 16 \end{pmatrix}$$
 (18)

の解を Gauss の消去法を用いて求める。

3.1 単精度と倍精度

計算機において実数を表示するためには浮動小数点法が使われる。計算機の内部において 2 進数が使われていたとき、その表現は、以下のよう記述できる。

$$\pm (1.a_1 a_2 \cdots a_m) \times 2^e \tag{19}$$

では、単精度の場合に指数部が 8 ビットであったとしよう。いま、10 進数で 12.5 の数値を浮動小数点表示したいとする。まず符号は + なので符号の部分のビットは 0 である。12.5 は 2 進数表示で 1.1001×2^3 と表される。指数部分はバイアス 128-1=127 を使った記法を用いれば、 $(3+127)_{10}=(130)_{10}=(10000010)_2$ となる。仮数部は、正規化された 2 進数表示の場合には必ず先頭は 1 になるので、先頭を省略して $10010\cdots0$ となる。図示すれば以下のようになる。

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	 32
符号	指数部	-	-	-	-	-	-	-	仮数部	-	-	-	-	-	 -
0	1	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	 0

numpy の float32、float64 においては、numpy.finfo 関数を使ってそれぞれの仕様を確認することができる。

```
Machine parameters for float32 precision = 6 resolution = 1.0000000e-06 machep = -23 eps = 1.1920929e-07 negep = -24 epsneg = 5.9604645e-08 minexp = -126 tiny = 1.1754944e-38 maxexp = 128 max = 3.4028235e+38 nexp = 8 min = -max
```

ここから、単精度では指数部が 8bit で仮数部が 32-1-8=23bit あるので 10 進数では 6 桁の精度、倍精度では指数部が 11bit で仮数部が 64-1-11=52bit あるので 10 進数では 15 桁の精度があることがわかる。

3.2 $b = (15, 15, 26, 15)^T$ の場合

Gauss の消去法を使って $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の解 \mathbf{x} を求めた。単精度では、

```
x: [1. 1.0000001 0.9999999 1. ]
A * x: [14.99999964 15.0000006 25.9999994 14.99999905]
```

倍精度では、

```
x: [1. 1. 1. 1.]
A * x: [15. 15. 26. 15.]
```

比較すると、単精度の場合には7桁目以降で誤差が生じている。

3.3 $b = (16, 16, 25, 16)^T$ の場合

Gauss の消去法を使って $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の解 \mathbf{x} を求めた。単精度では、

```
x: [ 832.18555 1324.2953 -2407.5376 2021.451 ]
A * x: [16.00036621 15.99938965 25. 16.00097656]
```

倍精度では、

```
x: [ 832. 1324. -2407. 2021.]
A * x: [16. 16. 25. 16.]
```

比較すると、4桁目以降に誤差が生じている。これは、

4 課題 2

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 (20)

4.1 解と反復係数

5 プログラム

ソースコードを添付しますが、全て https://github.com/tychy/NumericalAnalysisPlayground にあります。各関数のテストもついています。

ソースコード 1 gauss の消去法

```
import numpy as np
\mathbf{def} \ \mathrm{scale}(A, \ x):
    scale\_ls = np.zeros\_like(x)
    for i \overline{in} range(A.shape[0]):
         \max \ idx = 0
         for j in range(A.shape[0]):
             if np.abs(A[i, j]) > np.abs(A[i, max_idx]):
                  \max_{i} i dx = j
         scale ls[i] = np.abs(A[i, max idx])
         x[i] = x[i] / np.abs(A[i, max idx])
         A[i,:] = A[i,:] \; / \; np.abs(A[i,\,max\_idx])
    return scale ls
\mathbf{def}\ \mathrm{pivot}(A,\,x,\,\mathrm{id}x):
    \max \ idx = idx
    for i in range(idx, A.shape[0]):
         \textbf{if} \; A[idx, \, i] > A[idx, \, max\_idx] \text{:}
             \max \ idx = i
    if \max idx != idx:
         buff = np.copy(A[max idx, :])
         A[\max idx, :] = A[idx, :]
         A[idx, :] = buff
         buffx = x[max idx]
         x[max idx] = x[idx]
         x[idx] = buffx
    return
def execute(A, b):
    assert A.shape[0] == A.shape[1], "A\_must\_be\_n\_*\_n"
    assert A.shape[0] == b.shape[0], "size_of_A_and_b_must_match"
    print("A:", A)
    print("b:", b)
    L = np.zeros like(A)
    for i in range(A.shape[0]):
         L[i, i] = 1
    scale ls = scale(A, b)
    print("Scaled_A:", A)
    pivot(A, b, 0)
    for i in range(1, A.shape[0]):
         pivot(A, b, i)
```

```
for j in range(i, A.shape[0]):
              \mathrm{coef} = A[j][i-1] \mathrel{/} A[i-1][i-1]
              A[j, :] = A[j, :] - A[i - 1, :] * coef
              b[j] = b[j] - b[i-1] * coef
              L[j, i-1] = coef
    x = np.zeros like(b)
    print("L:", L)
     for i in range(A.shape[0] - 1, -1, -1):
         x[i] += b[i]
         for j in range(i, A.shape[0] - 1):
              x[i] -= A[i][j+1] * x[j+1]
         x[i] /= A[i][i]
     \mathbf{print}(\texttt{"x:"},\,x)
     for i in range(A.shape[0]):
         A[i, :] = A[i, :] * scale_ls[i]
    return x, L, A
\mathbf{def} \operatorname{single}(A, b):
     print("----single----")
     A copy = np.copy(A).astype(np.float32)
     b_{copy} = np.copy(b).astype(np.float32)
     fi32 = np.finfo(np.float32)
     print(fi32)
    x, L, U = execute(A_copy, b_copy)
    print("A"*", A @ x.T)
    print("----END----")
\mathbf{def} \; \mathbf{double}(\mathbf{A}, \, \mathbf{b}):
    print("double")
     A\_copy = np.copy(A).astype(np.float64)
     b_{copy} = np.copy(b).astype(np.float64)
     fi64 = np.finfo(np.float64)
     print(fi64)
    x, L, U = execute(A\_copy, b\_copy)
     \mathbf{print}(\texttt{"A} \bot \texttt{*} \bot \texttt{x} \colon \texttt{"}, A @ x.T)
     print("----END-----")
\mathbf{if} \; \_\mathtt{name}\_\_ == \texttt{"}\_\mathtt{main}\_":
     A = np.array(
              [10.0, 1.0, 4.0, 0.0],
              [1.0, 10.0, 5.0, -1.0],
              [4.0, 5.0, 10.0, 7.0],
              [0.0, -1.0, 7.0, 9.0],
         ],
     b = np.array([15.0, 15.0, 26.0, 15.0])
    c = np.array([16.0, 16.0, 25.0, 16.0])
    single(A, b)
     double(A, b)
     single(A, c)
```

 $\mathrm{double}(A,\,c)$

ソースコード 2 スクリプトファイル名

参考文献

[1] 石原卓水島二郎. 理工学のための数値計算法. 2002.