# 数値計算法 第 9 回

## 連立一次方程式 (3)

濱本 雄治 [1]

情報工学部 情報通信工学科

2025 年 6 月 16 日

[1] hamamoto@c.oka-pu.ac.jp

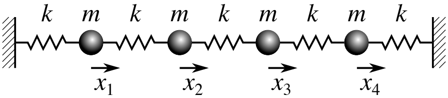
# 帯行列

- 定義

$$
\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{32} & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad \text{(三重対角行列)}
$$

- 特徴
  - 要素の大部分がゼロ (疎行列) で、非ゼロ成分が対角線付近に存在
  - 帯部分の要素だけ記憶すればよいのでメモリ効率がよい
  - 計算を工夫することで計算量 $\sim \mathcal{O}(N \times \text{帯の幅})$

# 三重対角行列の例: バネで繋がれた質点系




- 運動方程式

$$\begin{cases} m\ddot{x}_1 = -2kx_1 + kx_2 \\ m\ddot{x}_2 = kx_1 - 2kx_2 + kx_3 \\ m\ddot{x}_3 = kx_2 - 2kx_3 + kx_4 \\ m\ddot{x}_4 = kx_3 - 2kx_4 \end{cases}$$

- 4 つの質点が同じ振動数で $x_i = X_i \sin \omega t$ のように振動するとき

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \frac{m\omega^2}{k} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix}$$

# 係数行列が帯行列の連立一次方程式

- 三重対角行列の場合

$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 \\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & \ddots & \vdots \\
0 & a_{32} & \ddots & \ddots & 0 \\
\vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\
0 & \cdots & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_n
\end{pmatrix}
$$

- Gauss の消去法で解く場合の問題
  - ピボット選択は帯構造を破壊 $\rightarrow$ 使用メモリと計算量の増加
  - ピボット選択をしないとゼロに近いピボットで除算 $\rightarrow$ 丸め誤差の累積と計算の不安定化

# 復習: 非線形方程式の反復法

## 原理

1. 非線形方程式 $f(x) = 0$ を $x = g(x)$ の形に変形
2. 初期値 $x_0$ から漸化式
$$x_{k+1} = g(x_k)$$
で数列 $\{x_k\}$ を生成
3. 数列 $\{x_k\}$ が $\alpha$ に収束すれば $\alpha$ は非線形方程式の解

- 例: 原始反復法
$$x_{k+1} = \underbrace{x_k - hf(x_k)}_{g(x_k)}$$

- 例: Newton 法
$$x_{k+1} = \underbrace{x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}}_{g(x_k)}$$

# 連立一次方程式の反復法

## 原理

1. 連立一次方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}$ の形に変形
2. 初期値 $\boldsymbol{x}_0$ から漸化式

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{c}$$

   でベクトル列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ を生成
3. ベクトル列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ が $\boldsymbol{\alpha}$ に収束すれば $\boldsymbol{\alpha}$ は連立一次方程式の解

# Jacobi 法

- 係数 $\boldsymbol{A}$ を対角行列 $\boldsymbol{D}$、下三角行列 $\boldsymbol{L}$、上三角行列 $\boldsymbol{U}$ に分解

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}$$

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & d_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \ell_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \ell_{n1} & \cdots & \ell_{nn} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & u_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

- 漸化式の導出

$$(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \qquad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1}[-(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}],$$

$$\therefore \boldsymbol{x}_{k+1} = \underbrace{-\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})}_{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{x}_k + \underbrace{\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{c}}$$

  - $\boldsymbol{D}^{-1}$ は $\boldsymbol{D}$ の対角要素を逆数に変更した対角行列であることに注意

# Jacobi 法の例

- 2 変数の連立一次方程式

$$\begin{cases} 2x - \phantom{2}y = 1 \\ -x + 2y = 1 \end{cases}, \qquad \begin{cases} x = \dfrac{y+1}{2} \\ y = \dfrac{x+1}{2} \end{cases}$$

- 並列代入

$$(x, y) \leftarrow \left( \frac{y+1}{2}, \frac{x+1}{2} \right), \qquad \therefore \begin{cases} x_{k+1} = \dfrac{y_k + 1}{2} \\ y_{k+1} = \dfrac{x_k + 1}{2} \end{cases}$$

(1) 古い $x, y$ で右辺をすべて計算
(2) 左辺の変数にまとめて代入

Jacobi 法は並列計算に適している

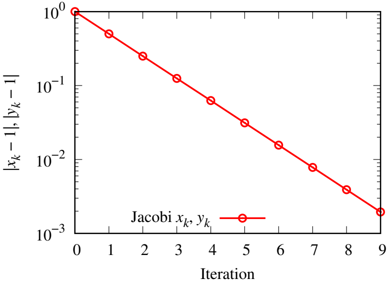
# Jacobi 法の計算例

- jacobi.c

```
#include <stdio.h>

int main(){
  double x = 0;
  double y = 0;

  for(int i=0; i!=10; ++i){
    printf("%d %e %e\n", i, x, y);

    double tmp = x;
    x = (y + 1.0) / 2;
    y = (tmp + 1.0) / 2;
  }
}
```

- 実行結果

```
$ gcc jacobi.c; ./a.out
...
7 9.921875e-01 9.921875e-01
8 9.960938e-01 9.960938e-01
9 9.980469e-01 9.980469e-01
```



# Gauss-Seidel 法

- 漸化式の導出

$$(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}, \qquad \boldsymbol{x}=(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}[-\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}],$$

$$\therefore \boldsymbol{x}_{k+1}=\underbrace{-(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}}_{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{x}_k+\underbrace{(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{c}}$$

- Jacobi 法と比較すると
  - $\boldsymbol{D} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{D}+\boldsymbol{L}$
  - $\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{U}$
- Jacobi 法に類似した形で表すと

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=-\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}_{k+1}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k)+\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$$

# Gauss-Seidel 法の例

- 2 変数の連立一次方程式 (ここまでは Jacobi 法と同じ)

$$\begin{cases} 2x - \ \ y = 1 \\ -x + 2y = 1 \end{cases}, \qquad \begin{cases} x = \dfrac{y+1}{2} \\ y = \dfrac{x+1}{2} \end{cases}$$

- 逐次代入

$$x \leftarrow \frac{y+1}{2}; \quad y \leftarrow \frac{x+1}{2}, \qquad \therefore \begin{cases} x_{k+1} = \dfrac{y_k+1}{2} \\ y_{k+1} = \dfrac{x_{k+1}+1}{2} = \dfrac{y_k+3}{4} \end{cases}$$

(1) 古い $y$ で $(y+1)/2$ を計算して $x$ に代入

(2) 新しい $x$ で $(x+1)/2$ を計算して $y$ に代入

$y$ が早く更新されるため、一般に Jacobi 法より収束が早い

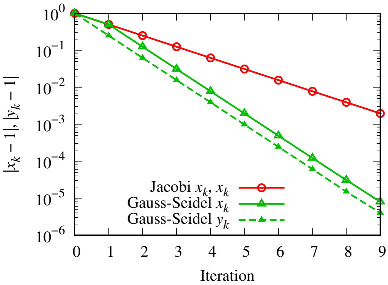
# Gauss-Seidel 法の計算例

- `gauss_seidel.c`

```
#include <stdio.h>

int main(){
  double x = 0;
  double y = 0;

  for(int i=0; i!=10; ++i){
    printf("%d %f %f\n", i, x, y);

    x = (y + 1.0) / 2;
    y = (x + 1.0) / 2;
  }
}
```

- 実行結果

```
$ gcc gauss_seidel.c; ./a.out
...
7 9.998779e-01 9.999390e-01
8 9.999695e-01 9.999847e-01
9 9.999924e-01 9.999962e-01
```



# 反復法の収束性

- $y_k$ の収束性

$$y_{k+1} = \frac{y_k + 3}{2}, \quad \therefore y_{k+1} - 1 = \frac{1}{4}(y_k - 1) = \cdots = \left(\frac{1}{4}\right)^{k+1}(y_0 - 1)$$

$y \to 1$ に収束

- 順序を入れ替えた連立一次方程式:

$$\begin{cases} -x + 2y = 1 \\ 2x - \quad y = 1 \end{cases}, \qquad \therefore \begin{cases} x_{k+1} = 2y_k - 1 \\ y_{k+1} = 2x_{k+1} - 1 = 4y_k - 3 \end{cases}$$

$$\therefore y_{k+1} - 1 = 4(y_k - 1) = \cdots = 4^{k+1}(y_0 - 1)$$

$y \to \infty$ に発散

- 対角優位行列

$$|a_{ii}| > \sum_{j(\neq i)} |a_{ij}| \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

- 係数行列 $\boldsymbol{A}$ が対角優位行列なら Jacobi と Gauss-Seidel 法は任意の初期値に対して収束
- 上記の例
  - 順序の入れ替え前

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \text{対角優位}$$

  - 順序の入れ替え後

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \text{対角優位でない}$$

# Successive Over-Relaxation (SOR) 法

- Gauss-Seidel 法の漸化式

$$\boldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{GS}} = \boldsymbol{D}^{-1}[-(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}_{k+1} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{b}]$$

- 修正量 $\boldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{GS}} - \boldsymbol{x}_k$ に加速パラメータ $\omega$ を掛けて収束を加速

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_{k+1} &= \boldsymbol{x}_k + \omega(\boldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{GS}} - \boldsymbol{x}_k) \\
&= (1-\omega)\boldsymbol{x}_k + \omega\boldsymbol{D}^{-1}[-(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}_{k+1} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{b}], \\
(\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{L})\boldsymbol{x}_{k+1} &= (1-\omega)\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}_k - \omega\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k + \omega\boldsymbol{b}, \\
\therefore \boldsymbol{x}_{k+1} &= (\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{L})^{-1}[-\{(\omega - 1)\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}_k + \omega\boldsymbol{U}\}\boldsymbol{x}_k + \omega\boldsymbol{b}]
\end{aligned}$$

  - $\omega = 1$ のとき Gauss-Seidel 法を再現
  - $1 < \omega < 2$、典型的には $\omega \sim 1.9$

# SOR 法の例

- Gauss-Seidel 法の漸化式

$$
\left\{
\begin{array}{rcl}
2x - \phantom{2}y &=& 1 \\
-x + 2y &=& 1
\end{array}
\right. ,
\qquad
\therefore
\left\{
\begin{array}{l}
x_{k+1}^{\mathrm{GS}} = \dfrac{y_k + 1}{2} \\[2ex]
y_{k+1}^{\mathrm{GS}} = \dfrac{x_{k+1} + 1}{2}
\end{array}
\right.
$$

- SOR 法の漸化式

$$
\left\{
\begin{array}{l}
x_{k+1} = x_k + \omega(x_{k+1}^{\mathrm{GS}} - x_k) = x_k + \omega\left(\dfrac{y_k + 1}{2} - x_k\right) \\[3ex]
y_{k+1} = y_k + \omega(y_{k+1}^{\mathrm{GS}} - y_k) = y_k + \omega\left(\dfrac{x_{k+1} + 1}{2} - y_k\right)
\end{array}
\right.
$$

# SOR 法の計算例

- gauss_seidel.c

```
#include <stdio.h>

int main(){
  double x = 0;
  double y = 0;
  double w = 1.1;

  for(int i=0; i!=10; ++i){
    printf("%d %.10e %.10e\n",
           i, x, y);

    x = (1-w) * x + w * (y+1.0)/2;
    y = (1-w) * y + w * (x+1.0)/2;
  }
}
```

- 実行結果

```
$ gcc gauss_seidel.c; ./a.out
...
7 9.9999956491e-01 9.9999985059e-01
8 9.9999996133e-01 9.9999999367e-01
9 1.0000000004e+00 1.0000000008e+00
```