

数值計算法 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

¹hamamoto@c.oka-pu.ac.jp

带行列



▶ 定義

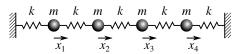
$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{32} & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix} (三重対角行列)$$

▶ 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
- \triangleright 計算を工夫することで計算量 $\sim \mathcal{O}(N \times$ 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

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

lacktriangle 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 → 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
 - → 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 x₀ 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 α に収束すれば α 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 Ax = b を x = Bx + c の形に変形
- 2. 初期値 x_0 から漸化式

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

でベクトル列 $\{x_k\}$ を生成

3. ベクトル列 $\{x_k\}$ が lpha に収束すれば lpha は連立一次方程式の解

Jacobi 法



ightharpoons 係数 A を対角行列 D、下三角行列 L、上三角行列 U に分解

▶ 漸化式の導出

$$(oldsymbol{D} + oldsymbol{L} + oldsymbol{U}) oldsymbol{x} = oldsymbol{b}, \qquad oldsymbol{x} = oldsymbol{D}^{-1}[-(oldsymbol{L} + oldsymbol{U}) oldsymbol{x} + oldsymbol{b}], \ dots : oldsymbol{x}_{k+1} = oldsymbol{D}^{-1}(oldsymbol{L} + oldsymbol{U}) oldsymbol{x}_k + oldsymbol{D}^{-1} oldsymbol{b}$$

imes $oldsymbol{D}^{-1}$ は $oldsymbol{D}$ 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

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

▶ 並列代入

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

- (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

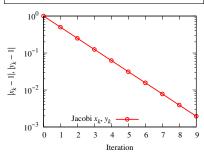


▶ jacobi.c

```
#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

$$(oldsymbol{D} + oldsymbol{L} + oldsymbol{U}) oldsymbol{x} = oldsymbol{b}, \qquad oldsymbol{x} = (oldsymbol{D} + oldsymbol{L})^{-1} [-oldsymbol{U} oldsymbol{x} + oldsymbol{b}], \ dots oldsymbol{x}_{k+1} = oldsymbol{\underbrace{-(oldsymbol{D} + oldsymbol{L})^{-1}oldsymbol{U}}_{oldsymbol{B}} oldsymbol{x}_k + oldsymbol{\underbrace{(oldsymbol{D} + oldsymbol{L})^{-1}oldsymbol{b}}_{oldsymbol{c}}$$

▶ Jacobi 法と比較すると

$$\triangleright$$
 D \rightarrow $D+L$

$$riangleright L + oldsymbol{U} \qquad o \qquad oldsymbol{U}$$

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)

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

▶ 逐次代入

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

- (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

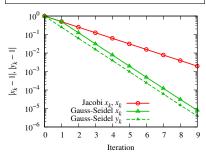


▶ gauss_seidel.c

```
#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

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

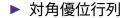
 $y \rightarrow 1$ に収束

▶ 順序を入れ替えた連立一次方程式:

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

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

 $y \to \infty$ に発散





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

- ► 係数行列 *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

$$oldsymbol{A} = \left(egin{array}{cc} 2 & -1 \ -1 & 2 \end{array}
ight) \qquad o \qquad$$
 対角優位

▷ 順序の入れ替え後

$$oldsymbol{A} = \left(egin{array}{cc} -1 & 2 \ 2 & -1 \end{array}
ight) \qquad
ightarrow$$
対角優位でない

Successive Over-Relaxation (SOR)法



▶ Gauss-Seidel 法の漸化式

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

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

$$egin{aligned} oldsymbol{x}_{k+1} &= oldsymbol{x}_k + \omega (oldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{GS}} - oldsymbol{x}_k) \ &= oldsymbol{x}_k + \omega [(oldsymbol{D} + oldsymbol{L})^{-1} (oldsymbol{b} - oldsymbol{U} - oldsymbol{U} oldsymbol{x}_k) - oldsymbol{x}_k] \ &dots \ &= (oldsymbol{D} + \omega oldsymbol{L})^{-1} [\omega oldsymbol{b} - \{\omega oldsymbol{U} + (\omega - 1) oldsymbol{D}\} oldsymbol{x}_k] \end{aligned}$$

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

SOR法の例



▶ Gauss-Seidel 法の漸化式

$$\begin{cases} x_{k+1}^{GS} = \frac{y_k + 1}{2} \\ y_{k+1}^{GS} = \frac{x_{k+1} + 1}{2} \end{cases}$$

▶ SOR 法の漸化式

$$\begin{cases} x_{k+1} = x_k + \omega(x_{k+1}^{GS} - x_k) = x_k + \omega\left(\frac{y_k + 1}{2} - x_k\right) \\ y_{k+1} = y_k + \omega(y_{k+1}^{GS} - y_k) = y_k + \omega\left(\frac{x_{k+1} + 1}{2} - y_k\right) \end{cases}$$

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 1.00000000004e+00 1.0000000008e+00
```

