数値解析　(塩田)

— ヤコビ法、ガウス・ザイデル法 —

状況設定　$A = (a_{ij})$ を n 次行列、$\boldsymbol{b} = (b_i)$ を n 次ベクトルとするとき、連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

の解に収束する様なベクトルの列 $\{\,\boldsymbol{x}^{(k)}\,\}_{k=0,1,\cdots}$ を作りたい。

1. ヤコビ法

ヤコビ法のアイデア　$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を

$$\begin{cases} a_{11}x_1 = b_1 - (\quad 0 \quad + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n\,) \\ a_{22}x_2 = b_2 - (\,a_{21}x_1 + \quad 0 \quad + \cdots + a_{2n}x_n\,) \\ \qquad \vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \ddots \\ a_{nn}x_n = b_n - (\,a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + \quad 0 \quad) \end{cases}$$

と変形する。右辺に $\boldsymbol{x}^{(k)}$ のデータを入れて、左辺から「新しい $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ 」を計算しよう。

ヤコビ法のアルゴリズム　$\boldsymbol{x}^{(k)}$ の成分を $\boldsymbol{x}^{(k)} = \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix}$ と書いて、

$\boldsymbol{x}^{(0)} :=$ 適当なベクトル ;

$k := 0$ **;**

repeat

　for $i := 1$ **to** n **do**

$$x_i^{(k+1)} := \left\{ b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} \right\} \Big/ a_{ii}\ ; \qquad \cdots\cdots (*)$$

　$k := k + 1$ **;**

until (終了条件) **;**

<u>実行例</u>　連立一次方程式 $\begin{cases} 3x - 2y = 1 \\ x + 3y = 4 \end{cases}$ に対して ヤコビ 法を適用すると、$(*)$ は

$$\begin{cases} 新\, x = \dfrac{1}{3}(1 + 2 \times 旧\, y) \\[2ex] 新\, y = \dfrac{1}{3}(4 - 旧\, x) \end{cases}$$

となり、

```
Step 0 :  x = ( 0.00000, 0.00000 )
Step 1 :  x = ( 0.33333, 1.33333 )
Step 2 :  x = ( 1.22222, 1.22222 )
Step 3 :  x = ( 1.14815, 0.92593 )
Step 4 :  x = ( 0.95062, 0.95062 )
Step 5 :  x = ( 0.96708, 1.01646 )
Step 6 :  x = ( 1.01097, 1.01097 )
Step 7 :  x = ( 1.00732, 0.99634 )
Step 8 :  x = ( 0.99756, 0.99756 )
Step 9 :  x = ( 0.99837, 1.00081 )
Step10 :  x = ( 1.00054, 1.00054 )
Step11 :  x = ( 1.00036, 0.99982 )
Step12 :  x = ( 0.99988, 0.99988 )
Step13 :  x = ( 0.99992, 1.00004 )
Step14 :  x = ( 1.00003, 1.00003 )
Step15 :  x = ( 1.00002, 0.99999 )
Step16 :  x = ( 0.99999, 0.99999 )
```

<u>収束しない例</u>　同じ方程式でも、式を入れ替えて $\begin{cases} x + 3y = 4 \\ 3x - 2y = 1 \end{cases}$ とすると

```
Step 0 :  x = (         0.00000,         0.00000 )
Step 1 :  x = (         4.00000,        -0.50000 )
Step 2 :  x = (         5.50000,         5.50000 )
Step 3 :  x = (       -12.50000,         7.75000 )
Step 4 :  x = (       -19.25000,       -19.25000 )
Step 5 :  x = (        61.75000,       -29.37500 )
Step 6 :  x = (        92.12500,        92.12500 )
Step 7 :  x = (      -272.37500,       137.68750 )
Step 8 :  x = (      -409.06250,      -409.06250 )
Step 9 :  x = (      1231.18750,      -614.09375 )
Step10 :  x = (      1846.28125,      1846.28125 )
Step11 :  x = (     -5534.84375,      2768.92188 )
Step12 :  x = (     -8302.76562,     -8302.76562 )
Step13 :  x = (     24912.29688,    -12454.64844 )
Step14 :  x = (     37367.94531,     37367.94531 )
Step15 :  x = (   -112099.83594,     56051.41797 )
Step16 :  x = (   -168150.25391,   -168150.25391 )
Step17 :  x = (    504454.76172,   -252225.88086 )
Step18 :  x = (    756681.64258,    756681.64258 )
Step19 :  x = (  -2270040.92773,   1135021.96387 )
Step20 :  x = (  -3405061.89160,  -3405061.89160 )
```

となって収束しなくなる。

<u>反復行列</u>　ヤコビ法の k ステップ目の誤差ベクトルを

$$\boldsymbol{e}^{(k)} := \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}$$

と置くと、

$$\boldsymbol{e}^{(k+1)} = H\boldsymbol{e}^{(k)} \qquad \cdots\cdots(\clubsuit)$$

が成り立つ。ただし H は「反復行列」と呼ばれる行列で

$$H = -D^{-1}(A-D), \qquad D = \begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn} \end{pmatrix}$$

ベクトルや行列に大きさ（ノルム）を定義すると収束性が議論できる。

<u>定義</u>　次の性質をもつ関数 $|\boldsymbol{v}|$ を n 項ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_i)$ のノルムと言う。

(1) $|\boldsymbol{x}| \geqq 0$ (等号は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$).
(2) スカラー α に対して　$|\alpha\boldsymbol{x}| = |\alpha| \times |\boldsymbol{x}|$.
(3) $|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}| \geqq |\boldsymbol{x}| + |\boldsymbol{y}|$.

また $||A|| := \max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \dfrac{|A\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}|}$ を n 次行列 $A = (a_{ij})$ のノルムと言う。

<u>例</u>　次の 3 種類がよく使われる。

(1) $|\boldsymbol{x}|_1 := \displaystyle\sum_{i=1}^{n} |x_i|$,　　$||A||_1 = \max_j \left(\displaystyle\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|\right)$.

(2) $|\boldsymbol{x}|_2 := \left(\displaystyle\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2\right)^{1/2}$,　$||A||_2 = \max_k (\mu_k)^{1/2}$
(μ_k は $\overline{{}^tA}A$ の固有値).

(3) $|\boldsymbol{x}|_\infty := \max_i |x_i|$,　　$||A||_\infty = \max_i \left(\displaystyle\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\right)$.

<u>命題</u>　上の例のいずれのノルムについても次が成り立つ。

(1) $|x_i| \leqq |\boldsymbol{x}|$.　　(2) $|A\boldsymbol{x}| \leqq ||A|| \times |\boldsymbol{x}|$.
(3) $||AB|| \leqq ||A|| \times ||B||$.

<u>定理 **A**</u>　各 i について

$$\sum_{j\neq i} |a_{ij}| < |a_{ii}|$$

が成り立てば ヤコビ法は収束する。(条件から $||H||_\infty < 1$ が言え、($\clubsuit$) と命題から直ちに示される。)

2. ガウス・ザイデル法

ガウス・ザイデル法のアイデア　$(*)$ では $x_i^{(k+1)}$ を計算するときに全て古い $x_j^{(k)}$ を使っている。折角 $x_1^{(k+1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k+1)}$ は計算してあるのだから、これを活かしてやろう。

ガウス・ザイデル法のアルゴリズム　$(*)$ の代わりに次の式を用いる：

$$x_i^{(k+1)} := \left\{ b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right\} \Big/ a_{ii} \ ; \qquad \cdots\cdots (**)$$

実行例　$\begin{cases} 3x - 2y = 1 \\ x + 3y = 4 \end{cases}$ を解く。

ヤコビ 法

Step 0 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.00000, 0.00000)
Step 1 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.33333, 1.33333)
Step 2 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.22222, 1.22222)
Step 3 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.14815, 0.92593)
Step 4 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.95062, 0.95062)
Step 5 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.96708, 1.01646)
Step 6 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.01097, 1.01097)
Step 7 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00732, 0.99634)
Step 8 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.99756, 0.99756)
Step 9 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.99837, 1.00081)
Step10 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00054, 1.00054)
Step11 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00036, 0.99982)
Step12 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.99988, 0.99988)
Step13 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.99992, 1.00004)
Step14 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00003, 1.00003)
Step15 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00002, 0.99999)
Step16 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.99999, 0.99999)

ガウス・ザイデル法

Step 0 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.00000, 0.00000)
Step 1 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.33333, 1.22222)
Step 2 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.14815, 0.95062)
Step 3 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.96708, 1.01097)
Step 4 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00732, 0.99756)
Step 5 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.99837, 1.00054)
Step 6 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00036, 0.99988)
Step 7 :	$\boldsymbol{x}$ = (0.99992, 1.00003)
Step 8 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00002, 0.99999)
Step 9 :	$\boldsymbol{x}$ = (1.00000, 1.00000)

定理 B　定理 A の条件が成り立てばガウス・ザイデル法も収束する。

証明　ヤコビ法の反復行列を $H = (h_{ij})$ と表し、また簡単のため ガウス・ザイデル法の k ステップ目、$k+1$ ステップ目の誤差ベクトルを

$$e^{(k)} = e = (e_i), \qquad e^{(k+1)} = f = (f_i)$$

と表す。ガウス・ザイデル法の i 行目は

$$a_{ii} x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k)}$$

と書け、解 x の満たす式

$$a_{ii} x_i = b_i - \sum_{j<i} a_{ij} x_j - \sum_{j>i} a_{ij} x_j$$

と辺々引けば

$$a_{ii}f_i = -\sum_{j<i} a_{ij}f_j - \sum_{j>i} a_{ij}e_j$$

が得られる。両辺を a_{ii} で割ることにより

$$f_i = \sum_{j<i} h_{ij}f_j + \sum_{j>i} h_{ij}e_j$$

を得る。これを用いて $|f_i| \leq ||H||_\infty \times |e|_\infty$ を示そう。まず $|f_1|$ は

$$\begin{aligned}
|f_1| &\leq \sum_{j>1} |h_{1j}| \times |e_j| \\
&\leq \sum_{j>1} |h_{1j}| \times |e|_\infty \\
&\leq ||H||_\infty \times |e|_\infty < |e|_\infty
\end{aligned}$$

を満たす。すると $|f_2|$ は

$$\begin{aligned}
|f_2| &\leq |h_{21}| \times |f_1| + \sum_{j>2} |h_{2j}| \times |e_j| \\
&\leq |h_{21}| \times |e|_\infty + \sum_{j>2} |h_{2j}| \times |e|_\infty \\
&= \sum_{j\neq 2} |h_{2j}| \times |e|_\infty \\
&\leq ||H||_\infty \times |e|_\infty < |e|_\infty
\end{aligned}$$

以下帰納的に

$$\begin{aligned}
|f_i| &\leq \sum_{j<i} |h_{ij}| \times |f_j| + \sum_{j>i} |h_{ij}| \times |e_j| \\
&\leq \sum_{j<i} |h_{ij}| \times |e|_\infty + \sum_{j>i} |h_{ij}| \times |e|_\infty \\
&= \sum_{j\neq i} |h_{ij}| \times |e|_\infty \\
&\leq ||H||_\infty \times |e|_\infty < |e|_\infty
\end{aligned}$$

が示される。従って

$$|f|_\infty = \max_i |\, f_i \,| \leq ||H||_\infty \times |e|_\infty$$

記号を元へ戻せば

$$|e^{(k+1)}|_\infty \leq ||H||_\infty \times |e^{(k)}|_\infty$$

となり

$$|e^{(k)}|_\infty \leq (||H||_\infty)^k \times |e^{(0)}|_\infty \to 0 \qquad (k \to \infty) \qquad \square$$