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 次正則行列、$\boldsymbol{b} = (b_i)$ 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

<u>アイデア</u>　$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を成分で書いて $a_{ii}\,x_i$ の形の項以外を右辺に移すと

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

と変形できる。右辺に $\boldsymbol{x}^{(k)}$ の成分を入れた値を a_{ii} で割って「新しい $\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}$ 」としよう。

アルゴリズム (ヤコビ法)

$\boldsymbol{x}^{(k)}$ 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
　　$$x_i^{(k+1)} = \left\{ b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} \right\} \Big/ a_{ii} \qquad \cdots\cdots (*)$$
　$k = k + 1$
until (終了条件)

<u>ヤコビ法の実行例</u>　連立一次方程式 $\begin{cases} 3\,x_1 - 2\,x_2 = 1 \\ \;\; x_1 + 3\,x_2 = 4 \end{cases}$ に対して $(*)$ は

$$\begin{cases} \text{新}\, x_1 = \dfrac{1}{3}(1 + 2 \times \text{旧}\, x_2) \\ \text{新}\, x_2 = \dfrac{1}{3}(4 - \text{旧}\, x_1) \end{cases}$$

となる。これに従ってベクトル列 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を作ると、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{(0)} &= (\ 0.000000000000,\ 0.000000000000 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(1)} &= (\ 0.333333333333,\ 1.333333333333 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(2)} &= (\ 1.222222222222,\ 1.222222222222 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(3)} &= (\ 1.148148148148,\ 0.925925925926 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(4)} &= (\ 0.950617283951,\ 0.950617283951 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(5)} &= (\ 0.967078189300,\ 1.016460905350 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(6)} &= (\ 1.010973936900,\ 1.010973936900 \ ) \\
&\vdots \\
\boldsymbol{x}^{(36)} &= (\ 0.999999999998,\ 0.999999999998 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(37)} &= (\ 0.999999999999,\ 1.000000000001 \ ) \\
\boldsymbol{x}^{(38)} &= (\ 1.000000000000,\ 1.000000000000 \ )
\end{aligned}
$$

となって解 $\boldsymbol{x} = (1,1)$ に収束する。(スペースの関係上、横ベクトルで表示しています。)

2. ガウス・ザイデル法

アイデア　ヤコビ法のアルゴリズムでは、$\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}$ を求めるときには既に新しい

$$\boldsymbol{x}_1^{(k+1)},\ \cdots,\ \boldsymbol{x}_{i-1}^{(k+1)}$$

が求まっているのに、古い $\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{i-1}^{(k)}$ を使っていた。収束するのであれば $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ の成分の方が良い値のはずなので、そっちを使おう。

アルゴリズム (ガウス・ザイデル法)

$\boldsymbol{x}^{(0)} =$ 適当なベクトル

$k = 0$

repeat

　for $i = 1$ **to** n

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

　$k = k + 1$

until (終了条件)

ガウス・ザイデル法の実行例　さっきと同じ連立一次方程式 $\begin{cases} 3\,x_1 - 2\,x_2 = 1 \\ x_1 + 3\,x_2 = 4 \end{cases}$ に対して　$(**)$ は

$$\begin{cases} 新\ x_1 = \dfrac{1}{3}(1 + 2 \times 旧\ x_2) \\ 新\ x_2 = \dfrac{1}{3}(4 - 新\ x_1) \end{cases}$$

となる。これに従ってベクトル列 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を作ると、

$$
\begin{array}{ll}
\boldsymbol{x}^{(0)} & = (\ 0.000000000000,\ 0.000000000000\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(1)} & = (\ 0.333333333333,\ 1.222222222222\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(2)} & = (\ 1.148148148148,\ 0.950617283951\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(3)} & = (\ 0.967078189300,\ 1.010973936900\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(4)} & = (\ 1.007315957933,\ 0.997561347356\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(5)} & = (\ 0.998374231570,\ 1.000541922810\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(6)} & = (\ 1.000361281873,\ 0.999879572709\ ) \\
 & \vdots \\
\boldsymbol{x}^{(18)} & = (\ 1.000000000005,\ 0.999999999998\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(19)} & = (\ 0.999999999999,\ 1.000000000000\ ) \\
\boldsymbol{x}^{(20)} & = (\ 1.000000000000,\ 1.000000000000\ )
\end{array}
$$

となり、ヤコビ法より少ないループ回数で解 $\boldsymbol{x} = (1, 1)$ に収束する。

3. 収束性

ヤコビ法が収束しない例　同じ方程式でも、式を入れ替えて $\begin{cases} x_1 + 3\,x_2 = 4 \\ 3\,x_1 - 2\,x_2 = 1 \end{cases}$ とするとヤコビ法の式 $(*)$ は

$$
\begin{cases}
\text{新}\ x_1 = 4 - 3 \times \text{旧}\ x_2 \\
\text{新}\ x_2 = \dfrac{1}{2}(-1 + 3 \times \text{旧}\ x_1)
\end{cases}
$$

となり、これに従ってベクトル列 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を作ると、

$$
\begin{array}{llrrl}
\boldsymbol{x}^{(0)} & = (& 0.000000000000, & 0.000000000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(1)} & = (& 4.000000000000, & -0.500000000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(2)} & = (& 5.500000000000, & 5.500000000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(3)} & = (& -12.500000000000, & 7.750000000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(4)} & = (& -19.250000000000, & -19.250000000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(5)} & = (& 61.750000000000, & -29.375000000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(6)} & = (& 92.125000000000, & 92.125000000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(7)} & = (& -272.375000000000, & 137.687500000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(8)} & = (& -409.062500000000, & -409.062500000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(9)} & = (& 1231.187500000000, & -614.093750000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(10)} & = (& 1846.281250000000, & 1846.281250000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(11)} & = (& -5534.843750000000, & 2768.921875000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(12)} & = (& -8302.765625000000, & -8302.765625000000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(13)} & = (& 24912.296875000000, & -12454.648437500000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(14)} & = (& 37367.945312500000, & 37367.945312500000 &) \\
\boldsymbol{x}^{(15)} & = (& -112099.835937500000, & 56051.417968750000 &)
\end{array}
$$

となって収束しなくなる。(ガウス・ザイデル法でも収束しない。)

収束しない理由は？

この例では「旧 x_1」,「旧 x_2」に掛かっている重みの絶対値 $3, \frac{3}{2}$ が 1 より大きいため、「旧 x_1」,「旧 x_2」の含んでいる誤差を増大させているのではないか。ということは、重みの分母の絶対値 $|\,a_{ii}\,|$ が大きいと収束し易いのではないか、と考えられ、実際、次のような定理が証明できる。

定理 A

各行番号 i について $\left(\sum_{\substack{1 \leqq j \leqq n \\ j \neq i}} |\, a_{ij} \,| \right) < |\, a_{ii} \,| \quad \cdots (\sharp)$ が成り立てば ヤコビ法は収束する。

この定理を証明するために、ベクトルや行列の大きさを測る「ノルム」を導入しよう。

定義

ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_i)$ と行列 $A = (a_{ij})$ に対し、そのノルム $|\,\boldsymbol{x}\,|, \|\, A \,\|$ を次式で定める：

$$|\,\boldsymbol{x}\,| = \max_{1 \leqq i \leqq n} |\, x_i \,|, \qquad \|\, A \,\| = \max_{1 \leqq i \leqq n} \left(\sum_{j=1}^{n} |\, a_{ij} \,| \right).$$

命題

ベクトルのノルムについて次が成り立つ：

(1) $|\,\boldsymbol{x}\,| \geqq 0$ （ 等号は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{o}$).

(2) スカラー α に対して $|\,\alpha \boldsymbol{x}\,| = |\,\alpha\,| \times |\,\boldsymbol{x}\,|$.

(3) $|\,\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}\,| \leqq |\,\boldsymbol{x}\,| + |\,\boldsymbol{y}\,|$.

命題

ベクトルと行列のノルムについて次が成り立つ：

(1) $\|\, A \,\| = \max_{\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{o}} \dfrac{|\,A\boldsymbol{x}\,|}{|\,\boldsymbol{x}\,|}$.

(2) $|\, x_i \,| \leqq |\,\boldsymbol{x}\,|, \quad \forall i$.

(3) $|\,A\boldsymbol{x}\,| \leqq \|\, A \,\| \times |\,\boldsymbol{x}\,|$.

(4) $\|\, AB \,\| \leqq \|\, A \,\| \times \|\, B \,\|$.

定義

「反復行列」 と呼ばれる行列 $H = (h_{ij})$ を次式で定義する：

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

成分で書けば

$$h_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{if } i = j \\ -a_{ij}/a_{ii} & \text{if } i \neq j \end{cases}$$

補題

ヤコビ法の k ステップ目の誤差ベクトル $\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}$ について

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

が成り立つ。

<u>**定理 A の証明**</u>　条件 ($\sharp$) から $||\,H\,|| < 1$ が言え、命題と補題より

$$|\,\boldsymbol{e}^{(k)}\,| = |\,H^k\boldsymbol{e}^{(0)}\,| \leqq ||\,H\,||^k \times |\,\boldsymbol{e}^{(0)}\,| \longrightarrow 0 \qquad (k \longrightarrow \infty)$$

誤差ベクトルがゼロベクトルに収束するので、$\boldsymbol{x}^{(k)}$ は真の解に収束する。□

定理 B

定理 A の条件 ($\sharp$) が成り立てばガウス・ザイデル法も収束する。

<u>証明</u>　簡単のためガウス・ザイデル法の $k,\,k+1$ ステップ目の誤差ベクトルをそれぞれ

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

と表す。ガウス・ザイデル法の i 行目は

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

と書けるので、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 $|f_i| \leqq ||H|| \times |e|$ を示そう。まず $|f_1|$ は

$$|f_1| \leqq \sum_{j>1} |h_{1j}| \times |e_j| \leqq \sum_{j>1} |h_{1j}| \times |e| \leqq ||H|| \times |e|$$

を満たす。特に $|f_1| \leqq ||H|| \times |e| < |e|$ が成り立つ。すると $|f_2|$ は

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

を満たし、やはり $|f_2| \leqq ||H|| \times |e| < |e|$ が成り立つ。以下帰納的に

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

が示される。従って

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

記号を元へ戻せば

$$|e^{(k+1)}| \leqq ||H|| \times |e^{(k)}|$$

となり

$$|e^{(k)}| \leqq ||H||^k \times |e^{(0)}| \longrightarrow 0 \qquad (k \longrightarrow \infty) \qquad \square$$