数値解析
第四回　連立方程式の解法
反復解法

舟木　剛

平成29年10月25日2限

シラバス

- 授業の目的
  - 工学分野でよく用いられる数値計算の算法ならびにそれらの数値的な特性について理解させる.
- 授業計画
  - 数値計算と誤差（1回）
    - 数値計算の必要性ならびに誤差の種類について説明するとともに，行列式とその性質，行及び列の交換などの基本演算，逆行列の定義と求め方について説明する.
  - 代数方程式（2回）
    - ２分法，Newton-Raphson 法，Bailey 法について解説する．また，多変数に対するNewton-Raphson 法と収束に関する留意点について述べる.
  - 連立方程式（３回）
    - Gauss の消去法，Gauss-Jordan の掃き出し法，LU 分解法の手順ならびに計算複雑度について解説する．また，Jacobi 法，Gauss-Seidel 法，SOR 法などの反復法について手順並びに収束条件について解説する.
  - 行列の固有値（３回）
    - 固有値の性質，べき乗法，Householder 法，QR 法について述べる．QR 法の収束定理について解説する.
  - 補間法（２回）
    - 線形補間，Lagrange 補間，Newton 補間，スプライン補間について述べる．多項式補間については算出方法をスプライン補間については３次のスプライン関数の導出方法を説明する．また，自然なスプライン関数とその特徴について解説する.
  - 関数近似（１回）
    - 最小２乗法による関数の近似について解説する.
  - 数値積分（１回）
    - 台形公式，シンプソンの公式による数値積分について解説する.
  - 常微分方程式（１回）
    - 単区分法である Euler 法，修正Euler 法，Runge-Kutta 法ならびに複区分法である Adams-Moulton の予測子・修正子法について解説する．また，数値不安定性についても解説する.
- 教科書 佐藤・中村共著「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社

ガウスの消去法の計算誤差

- 丸め誤差 → 伝播
- 測定誤差 → 実験における測定値
- 変換誤差 → アナログ･デジタル変換
- n元連立方程式の一般形$AX_t = b$
  - 定数項bをδ_b変化させた場合の解X_tの変化δ_x (bに誤差δ_bがある場合)
    - $AX_t = b$ → $A(X_t + \delta_x) = b + \delta_b$
      - $A\delta_x = \delta_b$ → $\delta_x = A^{-1}\delta_b$

ガウスの消去法の計算誤差

- ノルムの関係
  - $\|b\| \leq \|A\|\|X_t\|$ $\rightarrow$ $\frac{1}{\|X_t\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|}$
  - $\|\delta_x\| \leq \|A^{-1}\|\|\delta_b\|$
  - 解X_tの相対誤差$\frac{\|\delta_x\|}{\|X_t\|}$
    - 相対誤差の上限$\frac{\|\delta_x\|}{\|X_t\|} \leq \frac{\|A\|\|A^{-1}\|\|\delta_b\|}{\|b\|}$
    - 条件数 $\mathrm{cond}(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$→ 1に近いほど誤差は小さい
      - $I = AA^{-1}$
      - $\|I\| \leq \|A\|\|A^{-1}\|$

計算誤差

- 係数行列Aの誤差δ_Aをノルムで考える
  - $(A+\delta_A)(X_t+\delta_X)=b$
  - $AX_t+A\delta_X+\delta_A X_t+\delta_A\delta_X=b$
  - $A\delta_X+\delta_A X_t+\delta_A\delta_X=0$
  - $-A\delta_X=\delta_A X_t+\delta_A\delta_X$
  - $-\delta_X=A^{-1}\delta_A X_t+A^{-1}\delta_A\delta_X$

計算誤差

- つづき
  - $\|-\delta_x\| \le \|A^{-1}\|\|\delta_A\|\|X_t\| + \|A^{-1}\|\|\delta_A\|\|\delta_x\|$
  - $\|\delta_x\| - \|A^{-1}\|\|\delta_A\|\|\delta_x\| = (1 - \|A^{-1}\|\|\delta_A\|)\|\delta_x\| \le \|A^{-1}\|\|\delta_A\|\|X_t\|$
  - 相対誤差の上限

$$\frac{\|\delta_x\|}{\|X_t\|} \le \frac{\|A^{-1}\|\|\delta_A\|}{1 - \|A^{-1}\|\|\delta_A\|} = \frac{\|A^{-1}\|\|A\|\frac{\|\delta_A\|}{\|A\|}}{1 - \|A^{-1}\|\|A\|\frac{\|\delta_A\|}{\|A\|}}$$

連立方程式の求解

- ガウスの消去法
  - 元数が多いと計算量も莫大となる
- 反復解法（反復法）による計算量の低減
  - ヤコビの反復法
  - ガウスザイデルの反復法

ヤコビの反復法

- 4元連立方程式
  - $$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 = b_3 \\ a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 = b_4 \end{cases}$$

  ただし対角項$a_{ii} \neq 0$ $(i = 1,2,3,4)$とする（分母に使うので）
  - 解の予測値
    - $$\begin{cases} x_1{}^{(k+1)} = \dfrac{b_1 - a_{12}x_2{}^{(k)} - a_{13}x_3{}^{(k)} - a_{14}x_4{}^{(k)}}{a_{11}} \\ x_2{}^{(k+1)} = \dfrac{b_2 - a_{21}x_1{}^{(k)} - a_{23}x_3{}^{(k)} - a_{24}x_4{}^{(k)}}{a_{22}} \\ x_3{}^{(k+1)} = \dfrac{b_3 - a_{31}x_1{}^{(k)} - a_{32}x_2{}^{(k)} - a_{34}x_4{}^{(k)}}{a_{33}} \\ x_4{}^{(k+1)} = \dfrac{b_4 - a_{41}x_1{}^{(k)} - a_{42}x_2{}^{(k)} - a_{43}x_3{}^{(k)}}{a_{44}} \end{cases}$$

    $x_i{}^{(k)}$が解に収束するまで繰り返す

    反復回数$k = 1,2,3,\cdots$。$x_i{}^{(1)}$は解の予測値の初期値

ヤコビの反復法

- 収束判定
  - ${x_i}^{(k)}$と${x_i}^{(k+1)}$の絶対誤差，相対誤差で評価
    - $\sum_{i=1}^{n}\left|{x_i}^{(k+1)} - {x_i}^{(k)}\right| \leq \varepsilon$または$\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{{x_i}^{(k+1)} - {x_i}^{(k)}}{{x_i}^{(k+1)}}\right| \leq \varepsilon$
    - 1回の反復計算毎の乗除算回数n^2（n元の連立方程式）
      - 反復回数k ではkn^2
  - 近似解が収束するとは限らない
    - 収束条件と反復回数は？

ヤコビの反復法

- 変形
  - $$\begin{cases} a_{11}x_1{}^{(k+1)} = b_1 - a_{12}x_2{}^{(k)} - a_{13}x_3{}^{(k)} - a_{14}x_4{}^{(k)} \\ a_{22}x_2{}^{(k+1)} = b_2 - a_{21}x_1{}^{(k)} - a_{23}x_3{}^{(k)} - a_{24}x_4{}^{(k)} \\ a_{33}x_3{}^{(k+1)} = b_3 - a_{31}x_1{}^{(k)} - a_{32}x_2{}^{(k)} - a_{34}x_4{}^{(k)} \\ a_{44}x_4{}^{(k+1)} = b_4 - a_{41}x_1{}^{(k)} - a_{42}x_2{}^{(k)} - a_{43}x_3{}^{(k)} \end{cases}$$
  - 行列表現
    - $$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1{}^{(k+1)} \\ x_2{}^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n{}^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & 0 & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1{}^{(k)} \\ x_2{}^{(k)} \\ \vdots \\ x_n{}^{(k)} \end{bmatrix}$$

ヤコビの反復法

- n元連立方程式の一般形$AX = b$
  - 係数行列Aの分解
    - 係数行列$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$ 対角行列$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$
    - 下三角行列$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix}$ 上三角行列$U = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$
    - $A = L + D + U$
  - ヤコビの反復法の近似解の一般表現
    - $DX^{(k+1)} = -(L + U)X^{(k)} + b$
      - $X^{(k+1)} = HX^{(k)} + Z$
        - $H = -D^{-1}(L + U)$　反復行列（対角項で除した非対角要素）
        - $\mathrm{Z} = D^{-1}b$　対角項で除した定数項

ヤコビの反復法

- 反復回数$k = K$で解$X^{(K)}$が真値となる場合
  - $X^{(K)} = HX^{(K)} + Z$
  - 反復回数k+1回目の近似解$X^{(k+1)}$の誤差
    - $X^{(K+1)} - X^{(K)} = \left[HX^{(K)} + Z\right] - \left[HX^{(K-1)} + Z\right]$
      $= H\left[X^{(K)} - X^{(K-1)}\right]$
      - 右辺は反復回数K 回目の誤差
      - 反復ごとに誤差はH倍される
    - 初期値$X^{(1)}$との関係
      - $\left\|X^{(K+1)} - X^{(K)}\right\| \leq \|H\|^K \left\|X^{(1)} - X^{(0)}\right\|$

ヤコビの反復法

- Hが収束の可否を決める
  - 収束条件$\|H\| < 1$
  - 係数行列の要素を用いた表現
    - $\sum_{j \neq i} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1 \qquad (i = 1,2,\cdots,n)$→各行
      - 係数行列の対角要素の絶対値が，その行の他の要素の絶対値の和より大きい
      - 対角優位
  - 収束次数は1次　→　反復回数多い
  - 収束するのは
    - 対角優位，係数行列が対称

ヤコビの反復法

- 収束に要する反復回数
  - 反復行列の固有値λ
    - $Hx = \lambda x \ \rightarrow \ \det(H - \lambda I) = |H - \lambda I| = \begin{vmatrix} \lambda & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ a'_{21} & \lambda & & a'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a'_{n1} & a'_{n2} & \cdots & \lambda \end{vmatrix}$
    - 絶対値が最大の固有値λ_{max}
      - $\left\| X^{(k+1)} - X^{(K)} \right\| \approx {\lambda_{max}}^{k} \left\| X^{(1)} - X^{(K)} \right\|$(収束とは別)
      - 誤差をεより小さくするための反復回数N
        - $N \approx \frac{\log \varepsilon}{\log \lambda_{max}}$ → 見積もるには固有値計算必要
        - Hの最大要素で代用も可　$0 < \lambda_{max} \leq \|H\| < 1$

ガウス・ザイデルの反復法

- ヤコビの反復法の変形
  - 4元連立方程式
    - $$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 = b_3 \\ a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 = b_4 \end{cases}$$

    対角項$a_{ii} \neq 0 \ \ (i = 1,2,3,4)$とする
  - 解の予測値
    - $$\begin{cases} x_1{}^{(k+1)} = \frac{b_1 - a_{12}x_2{}^{(k)} - a_{13}x_3{}^{(k)} - a_{14}x_4{}^{(k)}}{a_{11}} \\ x_2{}^{(k+1)} = \frac{b_2 - a_{21}x_1{}^{(k+1)} - a_{23}x_3{}^{(k)} - a_{24}x_4{}^{(k)}}{a_{22}} \\ x_3{}^{(k+1)} = \frac{b_3 - a_{31}x_1{}^{(k+1)} - a_{32}x_2{}^{(k+1)} - a_{34}x_4{}^{(k)}}{a_{33}} \\ x_4{}^{(k+1)} = \frac{b_4 - a_{41}x_1{}^{(k+1)} - a_{42}x_2{}^{(k+1)} - a_{43}x_3{}^{(k+1)}}{a_{44}} \end{cases}$$

    反復回数$k = 1,2,3,\cdots$ $x_i{}^{(0)}$は解の予測値の初期値

上から計算
ヤコビの反復法の$x_i{}^{(k)}$
を計算済みの$x_i{}^{(k+1)}$
に置き換える

ヤコビの反復法より
収束速い

ガウス・ザイデルの反復法

- ${x_i}^{(k+1)}$の項を左辺にもってくる
  - $\begin{cases} a_{11}{x_1}^{(k+1)} = b_1 - a_{12}{x_2}^{(k)} - a_{13}{x_3}^{(k)} - a_{14}{x_4}^{(k)} \\ a_{21}{x_2}^{(k+1)} + a_{22}{x_2}^{(k+1)} = b_2 - a_{23}{x_3}^{(k)} - a_{24}{x_4}^{(k)} \\ a_{31}{x_2}^{(k+1)} + a_{32}{x_3}^{(k+1)} + a_{33}{x_3}^{(k+1)} = b_3 - a_{34}{x_4}^{(k)} \\ a_{41}{x_2}^{(k+1)} + a_{42}{x_3}^{(k+1)} + a_{43}{x_4}^{(k+1)} + a_{44}{x_4}^{(k+1)} = b_4 \end{cases}$
  - 行列表現
    - $\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} {x_1}^{(k+1)} \\ {x_2}^{(k+1)} \\ \vdots \\ {x_n}^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} {x_1}^{(k)} \\ {x_2}^{(k)} \\ \vdots \\ {x_n}^{(k)} \end{bmatrix}$
    - $(D+L)X^{(k+1)} = b - UX^{(k)}$
    - $X^{(k+1)} = (D+L)^{-1}b - (D+L)^{-1}UX^{(k)}$
      - $H = -(D+L)^{-1}U$ 反復行列

ガウス･ザイデルの反復法

- 収束条件
  - $\|H\| < 1$
  - 絶対値最大の固有値λ_{max}との関係
    - $\lambda_{max} \leq \|H\| < 1$　(証明はムズイので略)
    - Hの絶対値最大の要素で求めた場合の収束条件
      - $\sum_{j \neq i} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1 \qquad (i = 1,2,\cdots,n)$
      - 誤差をεより小さくするための反復回数N
        - $N \approx \frac{\log \varepsilon}{\log \lambda_{max}}$
        - ヤコビの反復法の収束条件と同等
      - 収束条件を満たさない場合は，解が存在しても収束しない

ガウス・ザイデルの反復法

- 収束条件満たさない場合は，解が存在しても収束しない
  - 行・列を交換して，収束条件を満たすようにする（前処理）
  - 例
    - 前処理前 $\begin{cases} 4x_1 + 2x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 - 3x_2 + x_3 = 8 \\ 3x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 8 \end{cases}$
      - 三行目ー一行目
    - 前処理後 $\begin{cases} 4x_1 + 2x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 - 3x_2 + x_3 = 8 \\ -x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 5 \end{cases}$
      - 収束条件を満たす

加速緩和法

- 解の収束を早める
- 反復公式で求めた${x_i}^{(k+1)}$を用いた補正値y_i
  - $$\begin{cases} y_1 = {x_1}^{(k)} + \alpha\left({x_1}^{(k+1)} - {x_1}^{(k)}\right) \\ y_2 = {x_2}^{(k)} + \alpha\left({x_2}^{(k+1)} - {x_2}^{(k)}\right) \\ y_3 = {x_3}^{(k)} + \alpha\left({x_3}^{(k+1)} - {x_3}^{(k)}\right) \\ y_4 = {x_4}^{(k)} + \alpha\left({x_4}^{(k+1)} - {x_4}^{(k)}\right) \end{cases}$$
    - y_iを${x_i}^{(k+1)}$として反復計算に用いる
    - α:加速係数→$\alpha = 1$は，ヤコビ，ガウスザイデルに一致
      - 通常$0 < \alpha < 2$。大きすぎると発散，小さすぎると収束しない