２００５年６月１日（水）

数値解析講義　前期水曜3限
３年（2005）

青柳　睦

aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター５階５０２

講義内容

{括弧}の項目はSkipまたは参考程度

１．超越方程式（非線形方程式）の解法

１．１　２分法　→　演習

１．２　{補間法}

１．３　ニュートン法　→　演習

２．代数方程式の解法

２．１　グラーフェの方法　→　（演習）

２．２　{ベルヌーイの方法}

３．連立一次方程式の解法

３．１　行列計算　→　演習

３．２　ガウスの消去法　→　演習

３．３　３重対角行列の場合の解法

３．４　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学社会学？分野で活用されている計算科学の概論を紹介する（予定）．

3．5　特異値分解法

3．6　共役勾配法　→演習

3．7　反復法　→演習

3.7.1 ヤコビ　　　3．7．2　ガウス･ザイデル

3．7．3　{加速過緩和(SOR＊)法(参考)}

4．固有値と固有ベクトルの近似計算

4．1　レバリエールの方法

4．2　3重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算

4．3　ランチョスの方法(3重対角行列への帰着)

4．4　ギブンスの方法(対称な3重対角行列への帰着)

4．5　ヤコビの方法(対角行列への帰着)

5．ラグランジュの未定乗数法

6．勾配法

6．1　最急降下法

6．2　最急降下加速法

6．3　ステップ幅の決め方

成績評価，その他

- 出席点５割＋前期末試験５割
- 講義ノートは，毎回配りますが
  もし欠席したら各自でDLしてください
  server-500.cc.kyushu-u.ac.jp
  （講義ノートはその週の金曜日１７時までには公開）
- 座席指定でお願いします
  ３０分後には座席表から出欠を取ります
- 研究室の電話は 092-642-3838
- メールは，aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp
  Subjectには，「数値解析」と記入
  してください

３．７　反復法

３．７．１ Jacobiの方法

$$Ax = b$$

$$A = (a_{ij}) \quad : \ n \times n \text{ 行列}$$

$$x = {}^t(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

$$b = {}^t(b_1, b_2, \ldots, b_n)$$

$$A = D + E + F$$

D :対角行列

E :下半三角行列

F :上半三角行列

$$\underset{A}{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}} = \underset{D}{\begin{pmatrix} a_{11} & & & 0 \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \ddots & \\ & & & & a_{nn} \end{pmatrix}} + \underset{E}{\begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ a_{21} & 0 & & \\ a_{31} & a_{32} & 0 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}} + \underset{F}{\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ & & 0 & & \vdots \\ & 0 & & \ddots & \vdots \\ & & & & 0 \end{pmatrix}}$$

対角行列　下半三角行列 上半三角行列

$$(D+E+F)x = b$$

$$D\, x^{(k+1)} = -(E+F)\, x^{(k)} + b$$

「Xが解ならば、左辺＝右辺」という関係を
繰り返し法に適用する

$$x^{(k+1)} = -D^{-1}(E+F)\, x^{(k)} + D^{-1}b, \qquad k = 0, 1, \ldots$$

これを成分毎に書くと、

$$x_i^{(k+1)} = -\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \left(\frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}}, \qquad k = 0, 1, \ldots$$

要素を陽に書き下すと‥

$$
\left\{
\begin{array}{lcl}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n & = & b_2 \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n & = & b_3 \\
 & \vdots & \\
 & \vdots & \\
a_{j1}x_1 + \cdots + a_{j,j-1}x_{j-1} + a_{jj}x_j + a_{j,j+1}x_{j+1} + \cdots + a_{jn}x_n & = & b_j \\
 & \vdots & \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1} + a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}
\right.
$$

対角項に注目し・・

$$
\left\{
\begin{array}{llll}
a_{11}x_1 + (& a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \quad \cdots & + a_{1n}x_n) & = b_1 \\
a_{22}x_2 + (a_{21}x_1 & + a_{23}x_3 + \quad \cdots & + a_{2n}x_n) & = b_2 \\
a_{33}x_3 + (a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + & + \quad \cdots & + a_{2n}x_n) & = b_3 \\
 & & & \vdots \\
 & & & \vdots \\
a_{jj}x_j + (a_{j1}x_1 + \quad \cdots & + a_{j,j-1}x_{j-1} \quad + a_{j,j+1}x_{j+1} + \quad \cdots & + a_{jn}x_n) & = b_j \\
 & & & \vdots \\
a_{nn}x_n + (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + & \cdots \quad + a_{n,n-1}x_{n-1} &) & = b_n
\end{array}
\right.
$$

X1，x2･･について形式的に解くと･･

$$
\begin{cases}
x_1 = a_{11}^{-1}\{b_1 - (\quad a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n)\} \\
x_2 = a_{22}^{-1}\{b_2 - (a_{21}x_1 \quad + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n)\} \\
x_3 = a_{33}^{-1}\{b_3 - (a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + \quad + \cdots + a_{2n}x_n)\} \\
\quad \vdots \\
\quad \vdots \\
x_j = a_{jj}^{-1}\{b_1 - (a_{j1}x_1 + \cdots + a_{j,j-1}x_{j-1} \quad + a_{j,j+1}x_{j+1} + \cdots + a_{jn}x_n)\} \\
\quad \vdots \\
x_n = a_{nn}^{-1}\{b_n - (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1} \quad)\}
\end{cases}
$$

$x_1 , \cdots, x_n$ が解なら左辺と右辺は等し（十分条件でしかない）

$$
\begin{cases}
x_{1}^{(k+1)} & = & a_{11}^{-1}\left\{b_1 - \left(\quad a_{12}x_{2_1}^{(k)} + a_{13}x_{3_1}^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
x_{2}^{(k+1)} & = & a_{22}^{-1}\left\{b_2 - \left(a_{21}x_{1_1}^{(k)} \quad + a_{23}x_{3_1}^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
x_{3}^{(k+1)} & = & a_{33}^{-1}\left\{b_3 - \left(a_{31}x_{1}^{(k)} + a_{32}x_{2_1}^{(k)} + \quad + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
 & \vdots & \\
 & \vdots & \\
x_{j}^{(k+1)} & = & a_{jj}^{-1}\left\{b_1 - \left(a_{j1}x_{1}^{(k)} + \cdots + a_{j,j-1}x_{j-1_1}^{(k)} \quad + a_{j,j+1}x_{j+1_1}^{(k)} + \cdots + a_{jn}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
 & \vdots & \\
x_{n}^{(k+1)} & = & a_{nn}^{-1}\left\{b_n - \left(a_{n1}x_{1}^{(k)} + a_{n2}x_{2_1}^{(k)} + \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)} \quad \right)\right\}
\end{cases}
$$

例.

$$8x_1 + x_2 = -5,$$
$$2x_1 + 3x_2 = 7$$

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$x^{(k+1)} = \begin{pmatrix} 0 & -1/8 \\ -2/3 & 0 \end{pmatrix} x^{(k)} + \begin{pmatrix} -5/8 \\ 7/3 \end{pmatrix}$$

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x^{(1)} = \begin{pmatrix} -5/8 \\ 7/3 \end{pmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{pmatrix} -11/12 \\ 33/12 \end{pmatrix},$$

$$x^{(3)} = \begin{pmatrix} -93/96 \\ 53/18 \end{pmatrix}, \quad x^{(4)} = \begin{pmatrix} -143/144 \\ 143/48 \end{pmatrix}$$

（真の解は，$x_1 = -1, \quad x_2 = 3$）

【ヤコビ法の収束条件】

$B = -D^{-1}(E+F)$と書くと・・

$$x^{(k+1)} = B\, x^{(k)} + D^{-1}b,$$

$$x^{(k)} = B\, x^{(k-1)} + D^{-1}b$$

これらより

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = B(x^{(k)} - x^{(k-1)})$$

ここで，$r^{(k+1)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$ とおくと

$$r^{(k+1)} = B r^{(k)}$$

$$(r^{(k+1)}, r^{(k+1)}) = (Br^{(k)}, Br^{(k)}) = ({}^tBBr^{(k)}, r^{(k)})$$

${}^tBB$ ： 対称行列

- 対称行列の固有値は実数である
- ${}^tBB = {}^tT\Lambda T$ を満たす直交行列 T が存在する

ここで, Λ は固有値 λ_i を対角要素にもつ対角行列

$${}^tTT = I$$

固有値と固有ベクトルを用いて･･

$$(r^{(k+1)}, r^{(k+1)}) = ({}^t BBr^{(k)}, r^{(k)})$$

$$= ({}^t T\Lambda T r^{(k)}, r^{(k)})$$

次に　$s^{(k)} = Tr^{(k)}$　なる変換を行うと

$$= (\Lambda s^{(k)}, s^{(k)})$$

$$\leq \max_i |\lambda_i| (s^{(k)}, s^{(k)})$$

$(s^{(k)}, s^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$ より

$$= \max_i |\lambda_i| (r^{(k)}, r^{(k)})$$

したがって、 $\| z \|^2 = (z, z)$ に注意すると、

$$\| r^{(k+1)} \| \le \sqrt{\max_i |\lambda_i|} \, \| r^{(k)} \|$$

よって【収束条件】 $\max_i |\lambda_i| < 1$

のときに限り･･

$$r^{(k)} \to 0, \quad k \to +\infty$$

となることが解る.

例.

$$8x_1 + x_2 = -5,$$
$$2x_1 + 3x_2 = 7$$

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

$$B = -D^{-1}(E+F) = \begin{pmatrix} 0 & -1/8 \\ -2/3 & 0 \end{pmatrix}$$

$${}^t BB = \begin{pmatrix} \frac{4}{9} & 0 \\ 0 & \frac{1}{64} \end{pmatrix}$$

（確かに・・）${}^t BB$　の固有値の絶対値の最大のものは　＜　1

$$\rho = \max_i \left| \lambda_i \right|$$ を　スペクトル半径と呼ぶ

３．７．２　ガウス・ザイデル法

上から順に実行

$$
\left\{
\begin{array}{lcl}
x_1^{(k+1)} & = & a_{11}^{-1}\left\{b_1 - \left(\quad a_{12}x_2^{(k)} + a_{13}x_3^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)} \right)\right\} \\
x_2^{(k+1)} & = & a_{22}^{-1}\left\{b_2 - \left(a_{21}x_1^{(k)} \quad + a_{23}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)} \right)\right\} \\
x_3^{(k+1)} & = & a_{33}^{-1}\left\{b_3 - \left(a_{31}x_1^{(k)} + a_{32}x_2^{(k)} + \quad + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)} \right)\right\} \\
 & \vdots & \\
 & \vdots & \\
x_j^{(k+1)} & = & a_{jj}^{-1}\left\{b_1 - \left(a_{j1}x_1^{(k)} + \cdots + a_{j,j-1}x_{j-1}^{(k)} \quad + a_{j,j+1}x_{j+1}^{(k)} + \cdots + a_{jn}x_n^{(k)} \right)\right\} \\
 & \vdots & \\
x_n^{(k+1)} & = & a_{nn}^{-1}\left\{b_n - \left(a_{n1}x_1^{(k)} + a_{n2}x_2^{(k)} + \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)} \quad \right)\right\}
\end{array}
\right.
$$

$x_j^{(k+1)}$ の計算において $x_1^{(k)}, \cdots, x_{j-1}^{(k)}$

は既にひとつ前の行演算で得られているので・・

$x_1^{(k)},\cdots,x_{j-1}^{(k)}$ を $x_1^{(k+1)},\cdots,x_{j-1}^{(k+1)}$ に置き換える

$$
\begin{cases}
x_1^{(k+1)} = a_{11}^{-1}\left\{b_1-\left(a_{12}x_2^{(k)}+a_{13}x_3^{(k)}+\cdots+a_{1n}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
x_2^{(k+1)} = a_{22}^{-1}\left\{b_2-\left(a_{21}x_1^{(k+1)}+a_{23}x_3^{(k)}+\cdots+a_{2n}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
x_3^{(k+1)} = a_{33}^{-1}\left\{b_3-\left(a_{31}x_1^{(k+1)}+a_{32}x_2^{(k+1)}+\;+\cdots+a_{2n}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
\qquad\vdots \\
\qquad\vdots \\
x_j^{(k+1)} = a_{jj}^{-1}\left\{b_1-\left(a_{j1}x_1^{(k+1)}+\cdots+a_{j,j-1}x_{j-1}^{(k+1)}+a_{j,j+1}x_{j+1}^{(k)}+\cdots+a_{jn}x_n^{(k)}\right)\right\} \\
\qquad\vdots \\
x_n^{(k+1)} = a_{nn}^{-1}\left\{b_n-\left(a_{n1}x_1^{(k+1)}+a_{n2}x_2^{(k+1)}+\cdots+a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}\right)\right\}
\end{cases}
$$

Gauss-Seidel のアルゴリズム

$$(D+E+F)x = b$$

$$D\,x^{(k+1)} = -E\,\underline{x^{(k+1)}} - F\,x^{(k)} + b, \qquad k = 0, 1, \ldots$$

これを成分毎に書くと、

$$a_{ii}x_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + b_i, \qquad k = 0, 1, \ldots$$

$$x_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1}\left(\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right)x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n}\left(\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right)x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}}, \qquad k = 0, 1, \ldots$$

$$(D+E)\,x^{(k+1)} = -F\ x^{(k)} + b$$ より

$$x^{(k+1)} = -(D+E)^{-1}F\ x^{(k)} + (D+E)^{-1}b$$

ここで改めて

$$B = -(D+E)^{-1}F$$

とおくと Jacobi の方法で述べたような収束条件が調べられる.

例.
$$8x_1 + x_2 = -5,$$
$$2x_1 + 3x_2 = 7$$

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= -(D+E)^{-1} F\, x^{(k)} + (D+E)^{-1} b \\ &= -\begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} x^{(k)} + \begin{pmatrix} 8 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -5 \\ 7 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{1}{24} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ -2 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} x^{(k)} + \frac{1}{24} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ -2 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -5 \\ 7 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{1}{24} \begin{pmatrix} 0 & 3 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} x^{(k)} + \frac{1}{24} \begin{pmatrix} -15 \\ 66 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

または

$$x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{8} x_2^{(k)} - \frac{5}{8},$$
$$x_2^{(k+1)} = -\frac{2}{3} x_1^{(k+1)} + \frac{7}{3}$$

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x^{(1)} = \begin{pmatrix} -5/8 \\ 11/4 \end{pmatrix},$$

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} -31/32 \\ 143/48 \end{pmatrix}, \qquad x^{(3)} = \begin{pmatrix} -383/384 \\ 1727/576 \end{pmatrix}$$

３．７．３　加速過緩和(SOR＊)法(参考)

Gauss-Seidel法による反復式で･･

$$D\,x^{(k+1)} = -E\,x^{(k+1)} - F\,x^{(k)} + b,$$

$$\xi^{(k+1)} = D^{-1}(b - E\,x^{(k+1)} - F\,x^{(k)})$$ と改めておき．．．

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega\xi_i^{(k+1)}$$

という重みつき平均値をとって(２段構で)
k＋１ステップ目の近似値を求める

：ω　加速係数

$$\xi_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1}\left(\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right)x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n}\left(\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right)x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}},$$

(＊) Succesive Over-Relaxation の略

$$\begin{cases} \xi^{(k+1)} = D^{-1}(b - E\ x^{(k+1)} - F\ x^{(k)}) \\ \quad x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega\,(\xi^{(k+1)} - x^{(k)}\ ) \end{cases}$$

$\xi^{(k+1)}$ を消去すると

$$x^{(k+1)} = (I + \omega D^{-1}E)^{-1}\{(1-\omega)I - \omega D^{-1}F\}\ x^{(k)}$$
$$+\,\omega(D + \omega E)^{-1}b$$

となる.（次ページに導出）

$\xi^{(k+1)}$ を消去すると

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega \{ D^{-1}(b - E\ x^{(k+1)} - F\ x^{(k)}) - x^{(k)} \}$$

×D

$$Dx^{(k+1)} = Dx^{(k)} + \omega(b - E\ x^{(k+1)} - F\ x^{(k)}) - \omega Dx^{(k)}$$

$$(D + \omega E)x^{(k+1)} = (1-\omega) Dx^{(k)} - \omega F\ x^{(k)} + \omega b$$

$$x^{(k+1)} = (D + \omega E)^{-1} D\{(1-\omega) I - \omega D^{-1} F\} x^{(k)} + \omega (D + \omega E)^{-1} b$$

$$x^{(k+1)} = (I + \omega D^{-1} E)^{-1}\{(1-\omega) I - \omega D^{-1} F\} x^{(k)} + \omega (D + \omega E)^{-1} b$$

加速過緩和(SOR)法

$$\xi_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1}\left(\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right)x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n}\left(\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right)x_j^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}},$$

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)\,x_i^{(k)} + \omega\,\xi_i^{(k+1)}$$

:ω 加速係数

ω＝1ではGS法、ω>1で上方緩和、ω<1で下方緩和

（参考） 線形反復法の一般論

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + c,$$

$$\rho = \max_i |\lambda_i|$$

すこしAdvanced な議論として・・

- ヤコビ法の収束半径とGSの収束半径
- SOR法の加速係数ωの最適値
- 誤差限界

方法 ＼ 反復行列	B	c
ヤコビ法	$-D^{-1}(E+F)$	$D^{-1}b$
ガウス－ザイデル法	$-(D+E)^{-1}F$	$(D+E)^{-1}b$
SOR法	$(I+\omega D^{-1}E)^{-1}\{(1-\omega)I-\omega D^{-1}F\}$	$\omega(D+\omega E)^{-1}b$