数値解析（松尾）　配付資料　　2019年10月21日

連立一次方程式に対する反復法

■ 一般の行列に対して

Jacobi 法

$\boldsymbol{x}_0$: given
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
　for $i := 1, 2, \ldots, N$ {
　　$x_i^{(k+1)} := (-\sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^{(k)} + b_i)/a_{ii}$
　}
}

Gauss–Seidel 法

$\boldsymbol{x}_0$: given
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
　for $i := 1, 2, \ldots, N$ {
　　$x_i^{(k+1)} := (-\sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k)} + b_i)/a_{ii}$
　}
}

SOR 法

$\boldsymbol{x}_0$, ω $(0 < \omega < 2)$: given
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
　for $i := 1, 2, \ldots, N$ {
　　$y_i^{(k+1)} := (-\sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k)} + b_i)/a_{ii}$
　　$x_i^{(k+1)} := x_i^{(k)} + \omega(y_i^{(k+1)} - x_i^{(k)})$
　}
}

$A = L + D + U$（D は対角，L は狭義下三角，U は狭義上三角）と置けば，

Jacobi 法： $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = -D^{-1}(L+U)\boldsymbol{x}^{(k)} + D^{-1}\boldsymbol{b}$
Gauss-Seidel 法： $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = -(D+L)^{-1}U\boldsymbol{x}^{(k)} + (D+L)^{-1}\boldsymbol{b}$
SOR 法： ある $0 < \omega < 2$ に対して，

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D - \omega U]\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega(D+\omega U)^{-1}\boldsymbol{b}$$

定理 1 (反復法の収束性) ある反復行列 H を使って $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = H\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{c}$ と書ける反復法において，$\rho(H) < 1$ ならば，この反復法は任意の初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ に対して，$\boldsymbol{x} = H\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}$ を満たす $\boldsymbol{x}$ に収束する．

■ 正定値対称行列に対して

CG 法（共役勾配法）

$\boldsymbol{x}_0$: given
$\boldsymbol{r}_0 := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$; $\boldsymbol{p}_0 := \boldsymbol{r}_0$
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
  $\alpha_k := (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)/(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)$
  $\boldsymbol{x}_{k+1} := \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$; $\boldsymbol{r}_{k+1} := \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k$
  $\beta_k := -(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k)/(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)$
  $\boldsymbol{p}_{k+1} := \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$
}

定理 2 (CG 法の収束性 (直接法的側面)) CG 法は任意の初期ベクトルに対して，（丸め誤差がなければ）高々n 回で真の解に到達して終了する．

CG 法はもともと最適化の文脈で，次の「目的関数」の最小化から生まれた．ただしここでは $\boldsymbol{x}^*$ は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の真の解（つまり $A\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}$）であり，$\boldsymbol{x}$ は $\mathbb{R}^n$ 上を動く変数とみなす．

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*, A(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)).$$

最小化の文脈では次の定理が成り立つ．

定理 3 (CG 法の収束性 (反復法的側面)) A の 2 ノルムに関する条件数を $\kappa = \mathrm{cond}_2(A)$ と書くとき，CG 法の数値解は

$$\phi(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \le 4\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^{2k}\phi(\boldsymbol{x}^{(0)}) \qquad (k = 0, 1, 2, \ldots)$$

を満たす．

上の定理をもとに，実際にはある正則行列 C を用いて

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow (C^{-1}AC^{-\top})(C^{\top}\boldsymbol{x}) = C^{-1}\boldsymbol{b}$$

と変形し，これに CG 法を用いることが多い．行列 C は,「A からの計算が容易で」「$C^{-1}\boldsymbol{x}$ の計算も容易で」「$C^{-1}AC^{-\top}$ の条件数が小さくなるように」選ぶ．この選び方は問題に強く依存するが，何もアイデアがない場合の定番は A の不完全 Cholesky 分解 (ILU 分解) である．

【演習】（自分の興味に従って自習し，理解・実装力を高めることを奨励する）

1. 反復法の収束の十分条件が色々知られている．例えば以下が成立する．これを示せ．
   定理．係数行列 A が狭義行優対角，すなわち $\sum_{j\neq i}|a_{ij}| < |a_{ii}|$ $(i = 1, \ldots, N)$ ならば Jacobi 法は収束する．これを示せ．
   （より一般の収束定理については,『数値解析入門』（山本）などを参照）．

2. 紹介した反復法の計算量を見積もってみよ．

3. 紹介した反復法を実装し，動かして挙動を観察せよ．係数行列 A は，様々なものを試すとよい．テスト問題としては例えば $A = \mathrm{diag}(-1, c, -1)$（$c > 2$）など．