クレジット：
UTokyo Online Education 数値解析 2017 松尾宇泰

ライセンス：
利用者は、本講義資料を、教育的な目的に限ってページ単位で利用することができます。特に記載のない限り、本講義資料はページ単位でクリエイティブ・コモンズ 表示-非営利-改変禁止 ライセンスの下に提供されています。
http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/

本講義資料内には、東京大学が第三者より許諾を得て利用している画像等や、各種ライセンスによって提供されている画像等が含まれています。個々の画像等を本講義資料から切り離して利用することはできません。個々の画像等の利用については、それぞれの権利者の定めるところに従ってください。

東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO

BY NC ND

数値解析（松尾）　配付資料 **2017年10月30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

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

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．