数値計算

大阪大学基礎工学部

永原正章

2012年6月7日(5限)

[変更] 休講と補講のお知らせ⋆⋆⋆

下記の3回休講します.

- 6月14日(木)(この日は,補講もありません)
- 6月21日(木)
- 7月12日(木)

講義室の変更および補講:

- 7月5日(木)$\longrightarrow$ 5限 (B102)･6限 (B102)
- 7月26日(木)$\longrightarrow$ 5限 (B102)･6限 (B102)

連立線形方程式

- N 変数の連立線形方程式

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N &= b_2 \\
&\vdots \\
a_{N1}x_1 + a_{N2}x_2 + \cdots + a_{NN}x_N &= b_N
\end{aligned}
$$

- ベクトル表現

$$
Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{N\times N}, \quad x \in \mathbb{R}^N, \quad b \in \mathbb{R}^N.
$$

連立線形方程式

- $Ax = b$
- 行列 A は正則と仮定する.
- 厳密解
$$x^* = A^{-1}b$$
- 変数の数 N が有限なら,厳密解も有限回の四則演算で求まる.
たとえば,Gauss の消去法.

連立線形方程式

- Gaussの消去法: 計算量 $\propto N^3$.
  - サイズNが10倍になれば,計算量は1000倍となる.
- 原理的には厳密解は求まるが,非常に計算時間がかかる場合,反復法により近似解を求めたほうが良い場合が多い.

Gauss消去法の計算時間

- $\mathsf{N} = 10000$ のとき,Gaussの消去法を使うと,
  $\mathsf{N}^3 = 10^{12}$回の四則演算が必要.
- $100\mathsf{G} = 10^{11}$ FLOPSのコンピュータ(1秒間に1000億回の浮動小数点演算ができるコンピュータ)を使って計算.
- 計算時間は
  $$\frac{10^{12}}{10^{11}} = 10\text{秒}$$
- $\mathsf{N} = 100000$ (変数が10倍)のときは,
  $\mathsf{N}^3 = 10^{15}$回の四則演算が必要.
- 同じコンピュータを使うとすると,計算時間は

$$\frac{10^{15}}{10^{11}} = 10000\text{秒} \approx 2\text{時間 } 47\text{分}$$ (計算時間は1000倍)

線形方程式に対する反復法

- 線形方程式

$$Ax = b$$

- 反復法

$$x[n+1] = Mx[n] + v, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

- 行列$M \in \mathbb{R}^{N\times N}$とベクトル$v \in \mathbb{R}^N$は

$$x = Mx + v = \phi(x)$$

がもとの方程式$Ax = b$と等価になるように選ぶ.

線形連立方程式の例

- 次の連立方程式を考える.

$$
\begin{aligned}
x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 1 \\
4x_1 + 5x_2 + 6x_3 &= 2 \\
7x_1 + 8x_2 + 10x_3 &= 4
\end{aligned}
$$

- まず,方程式の対角成分だけを左辺に残し,残りを右辺に移項する.

$$
\begin{aligned}
x_1 &= -2x_2 - 3x_3 + 1 \\
5x_2 &= -4x_1 - 6x_3 + 2 \\
10x_3 &= -7x_1 - 8x_2 + 4
\end{aligned}
$$

線形連立方程式の例(Jacobi法)

- 次の方程式が得られる.

$$\begin{aligned} x_1 &= -2x_2 - 3x_3 + 1 \\ x_2 &= -\frac{4}{5}x_1 - \frac{6}{5}x_3 + \frac{2}{5} \\ x_3 &= -\frac{7}{10}x_1 - \frac{8}{10}x_2 + \frac{4}{10} \end{aligned}$$

- これより,次の反復法を得る(Jacobi法).

$$\begin{aligned} x_1[n+1] &= -2x_2[n] - 3x_3[n] + 1 \\ x_2[n+1] &= -\frac{4}{5}x_1[n] - \frac{6}{5}x_3[n] + \frac{2}{5} \\ x_3[n+1] &= -\frac{7}{10}x_1[n] - \frac{8}{10}x_2[n] + \frac{4}{10} \end{aligned}$$

線形連立方程式の例(Jacobi法)

- Jacobi法 ($n = 0, 1, 2, \ldots$)

$$
\begin{aligned}
x_1[n+1] &= -2x_2[n] - 3x_3[n] + 1 \\
x_2[n+1] &= -\frac{4}{5}x_1[n] - \frac{6}{5}x_3[n] + \frac{2}{5} \\
x_3[n+1] &= -\frac{7}{10}x_1[n] - \frac{8}{10}x_2[n] + \frac{4}{10}
\end{aligned}
$$

- $x_2[n+1]$ を計算するのに$x_1[n]$ではなく,
  $x_1[n+1]$を使用する
- $x_3[n+1]$を計算するのに$x_1[n]$, $x_2[n]$ではなく,
  $x_1[n+1]$, $x_2[n+1]$を使用する

線形連立方程式の例(Gauss-Seidel法)

- Gauss-Seidel法 ($n = 0, 1, 2, \ldots$)

$$
\begin{aligned}
x_1[n+1] &= -2x_2[n] - 3x_3[n] + 1 \\
x_2[n+1] &= -\frac{4}{5}x_1[n+1] - \frac{6}{5}x_3[n] + \frac{2}{5} \\
x_3[n+1] &= -\frac{7}{10}x_1[n+1] - \frac{8}{10}x_2[n+1] + \frac{4}{10}
\end{aligned}
$$

線形方程式の反復法

- 連立方程式 $Ax = b$
- 行列 A を対角行列 D, 下三角行列 E および 上三角行列 F を用いて, $A = D + E + F$ と分解する.

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{NN} \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ a_{N1} & \dots & a_{N,N-1} & 0 \end{bmatrix},$$

$$F = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{N-1,N} \\ 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

線形方程式の反復法

Jacobi 法 $\phi(\mathsf{x}) = \underbrace{-\mathsf{D}^{-1}(\mathsf{E}+\mathsf{F})}_{\mathsf{M}}\mathsf{x} + \underbrace{\mathsf{D}^{-1}\mathsf{b}}_{\mathsf{v}}$

Gauss-Seidel 法 $\phi(\mathsf{x}) = \underbrace{-(\mathsf{D}+\mathsf{E})^{-1}\mathsf{F}}_{\mathsf{M}}\mathsf{x} + \underbrace{(\mathsf{D}+\mathsf{E})^{-1}\mathsf{b}}_{\mathsf{v}}$

加速緩和法

$$\phi(\mathsf{x}) = \underbrace{(\mathsf{I}+\omega\mathsf{D}^{-1}\mathsf{E})^{-1}\left\{(1-\omega)\mathsf{I}-\omega\mathsf{D}^{-1}\mathsf{F}\right\}}_{\mathsf{M}}\mathsf{x}$$

$$+\underbrace{\omega(\mathsf{D}+\omega\mathsf{E})^{-1}\mathsf{b}}_{\mathsf{v}}$$

反復法の収束性

- 方程式 $Ax = b$ に対する反復法

$$x[n+1] = Mx[n] + v$$

- $\phi(x) = Mx + v$
- 不動点定理より,写像ϕが$\mathbb{R}^N$ における縮小写像であれば,任意の初期ベクトル $x[0] \in \mathbb{R}^N$ に対して,反復法は厳密解 x^*に収束.

補題: 写像 ϕ が $\mathbb{R}^N$ における縮小写像⇔$\|M\| < 1$. ただし,

$$\|M\| := \sup_{x \in \mathbb{R}^N, x \neq 0} \frac{\|Mx\|_2}{\|x\|_2} = \sqrt{\max_{1 \le i \le n} |\lambda_i(M^\top M)|}$$

反復法が収束するための十分条件

- もし $\|M\| < 1$ ならば,線形方程式 $x = Mx + v$ は唯一つの解 x^* を持ち, 任意の初期ベクトル $x[0] \in \mathbb{R}^N$ に対して,反復法

$$x[n+1] = Mx[n] + v, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

  は厳密解 x^* に収束する.
- 逆は成り立たない.すなわち,$\|M\| \geq 1$であっても厳密解x^*に収束する反復法は存在する.

$\|M\| \geq 1$であっても収束する反復法

- 次の反復法を考える.ただし,$R > 1$ とする.

$$\begin{bmatrix} x_1[n+1] \\ x_2[n+1] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & R \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1[n] \\ x_2[n] \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

- ベクトル表現

$$x[n] = \begin{bmatrix} x_1[n] \\ x_2[n] \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} 0 & R \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

とおくと,$M^2 = M^3 = M^4 = \cdots = 0$ だから,

$$x[1] = Mx[0] + v,$$

$$x[2] = Mx[1] + v = M^2x[0] + Mv + v = Mv + v,$$

$$x[3] = Mx[2] + v = M^3x[0] + M^2v + Mv + v = Mv + v,$$

$\|M\| \geq 1$であっても収束する反復法

- 同様にして

$$x[n] = Mv + v, \quad n = 2, 3, \ldots$$

が成り立つ.すなわち,$x[n]$ は $Mv + v$ に収束する.

- 方程式 $x = Mx + v$ の解は $Mv + v$ である.
- 一方,

$$\|M\| = \left\| \begin{bmatrix} 0 & R \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right\| = R > 1.$$

- $R > 1$ は任意にとれるので,厳密解に収束する反復法で,$\|M\|$ のノルムがいくらでも大きいものが存在する.

反復法が収束するための必要十分条件

- 線形方程式

$$x = Mx + v$$

は一意解を持つとする

- 任意の初期ベクトル $x[0] \in \mathbb{R}^N$ に対して 反復法

$$x[n+1] = Mx[n] + v, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

が線形方程式$x = Mx + v$の厳密解 x^* に収束するための必要十分条件は,

$$\rho(M) < 1$$

- $\rho(M)$: 行列 M のスペクトル半径(固有値の絶対値の最大値)

$$\rho(M) := \max_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i(M)| .$$

証明

- 反復法

$$x[n+1] = Mx[n] + v, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

が任意の初期ベクトル $x[0]$ に対して厳密解 x^* に収束すると仮定する.

- このとき,

$$\begin{aligned} e[n] &= x[n] - x^* \\ &= (Mx[n-1] + v) - (Mx^* + v) \\ &= M(x[n-1] - x^*) \\ &= Me[n-1] \end{aligned}$$

証明

- $e[n] = Me[n-1], n = 0, 1, 2, \ldots$ より

$$e[n] = M^n e[0] = M^n(x[0] - x^*), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

- M の固有値を λ_i $(i = 1, 2, \ldots, N)$ とし,λ_i に属する M の固有ベクトルを w_i とおく ($Mw_i = \lambda_i w_i$が成り立つ).
- 初期ベクトルを $x[0] = w_i + x^*$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$ ととると,

$$\begin{aligned} e[n] &= M^n(w_i + x^* - x^*) \\ &= M^n w_i \\ &= M^{n-1}(Mw_i) \\ &= M^{n-1}(\lambda_i w_i) \\ &= \lambda_i M^{n-1} w_i = \cdots = \lambda_i^n w_i \end{aligned}$$

証明

- $e[n] = \lambda_i^n w_i$より
$$\|e[n]\| = \|\lambda_i^n w_i\| = |\lambda_i|^n \|w_i\|, \quad i = 1, 2, \ldots, N$$
- 任意の $x[0] \in \mathbb{R}^N$ に対して, 反復法は厳密解x*に収束するので,
$$\lim_{n \to \infty} e[n] = 0$$
- これより,
$$\lim_{n \to \infty} \|e[n]\| = \lim_{n \to \infty} |\lambda_i|^n \|w_i\| = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N$$
- $w_i \neq 0$ であるので,すべての$i = 1, 2, \ldots, N$ で $|\lambda_i| < 1$ でなければならない. すなわち,$\rho(M) < 1$ である.

証明

- 逆に $\rho(\mathsf{M}) < 1$ であると仮定する
- $1 - \rho(\mathsf{M}) > 0$ であるので,ある実数 $\varepsilon > 0$ が存在して,

$$1 - \rho(\mathsf{M}) > \varepsilon$$

- この ε に対して,ある行列ノルム $\|\cdot\|_\alpha$ が存在して,

$$\|\mathsf{M}\|_\alpha \leq \rho(\mathsf{M}) + \varepsilon < \rho(\mathsf{M}) + 1 - \rho(\mathsf{M}) = 1$$

- したがって,この行列ノルム $\|\cdot\|_\alpha$ を誘導するベクトルノルム $\|\cdot\|_\alpha$ のもとで, $\phi(\mathsf{x}) = \mathsf{Mx} + \mathsf{v}$ は $\mathbb{R}^\mathsf{N}$ の縮小写像

証明

- 反復法によって生成されるベクトル列 $\{x[n]\}$ は, 任意の初期ベクトル $x[0] \in \mathbb{R}^N$ に対して, このノルムの意味で厳密解 x^* に収束

$$\lim_{n \to \infty} \|x[n] - x^*\|_\alpha = 0$$

- ノルムの連続性とノルムの公理($\|x\|_\alpha = 0$ならば$x = 0$)より,

$$\lim_{n \to \infty} x[n] = x^*$$

安定行列

- スペクトル半径が1未満,すなわち

$$\rho(\mathsf{M}) < 1$$

となる行列をSchur安定行列または単に安定行列と呼ぶ.

- 次の反復法(漸化式)

$$\mathsf{x}[\mathsf{n}+1] = \mathsf{M}\mathsf{x}[\mathsf{n}]$$

が任意の初期ベクトル$\mathsf{x}[0] \in \mathbb{R}^{\mathsf{N}}$に対して,

$$\lim_{\mathsf{n}\to\infty} \mathsf{x}[\mathsf{n}] = 0$$

となるための必要十分条件がMが安定行列であること.

- 線形システムの安定性と密接に関係

Jacobi 法・Gauss-Seidel 法の収束条件⋆⋆⋆

方程式 $Ax = b$ の行列 A が対角優位行列ならば,

- Jacobi 法は,任意の初期ベクトルに対して厳密解に収束する.
- Gauss-Seidel 法は,任意の初期ベクトルに対して厳密解に収束する.
    - 対角優位行列とは

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

が成り立つ行列.

Gauss-Seidel 法の収束条件

方程式 $Ax = b$ の行列 A およびその対角成分行列 D が正定値対称行列ならば,

- Gauss-Seidel 法は,任意の初期ベクトルに対して厳密解に収束する.
  - 対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が正定値であるとは, $x \neq \mathbf{0}$ である任意のベクトル $x \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$x'Ax = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j > 0$$

    が成立ことを言う.
  - Aが正定値対称行列であるとき,$A > \mathbf{0}$ と表す.

例題1⋆⋆⋆

- 次の方程式を考える.

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}}_{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}}_{b}$$

- 行列Aは対角優位行列である.なぜなら

$$|a_{11}| = 2 > 1 = |a_{12}| + |a_{13}|$$
$$|a_{22}| = 3 > 2 = |a_{21}| + |a_{23}|$$
$$|a_{33}| = 2 > 1 = |a_{31}| + |a_{32}|$$

- したがって,上の方程式 $Ax = b$に対して,Jacobi法およびGauss-Seidel法による反復法は 任意の初期ベクトルに対して厳密解$x^* = A^{-1}b$に収束する.

練習問題

次の方程式に対するJacobi 法および Gauss-Seidel 法による反復法の収束性を調べよ.

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

解答例

- 行列

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$$

に対して,

$$|a_{11}| = 2 > 1 = |a_{12}|$$
$$|a_{22}| = 4 > 1 = |a_{21}|$$

であるので,行列Aは対角優位行列である.

- したがって,上の方程式に対するJcobi法およびGauss-Seidel法による反復法は 任意の初期ベクトルに対して厳密解x*に収束する.