# 1 連立方程式の解法 (反復法)

方程式 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解く事を考える.

反復法は打切り誤差を生じる為, 一般に直接法に比べて精度が落ちる. しかも, 必ず解けるとは限らない. しかしながら, 特に大きな次数の連立方程式については, 反復法の方が計算量の面で有利になる事がある.

実際, 先に紹介した直接法のガウスの消去法及び LU 分解法は, いずれも, 方程式の次数 $n$ に対し $n^3$ に比例する加減乗除が必要であった. それに対し, 以下で紹介する 2 つの反復法は (ステップ辺りの計算量は)$n^2$ に比例する計算量で済む. 但し, 反復回数は要求精度とサイズに比例するので, 同程度の精度の結果を得る為には結局 $n^3$ に比例する.

しかし, 係数行列自体を操作しない為, 係数行列が疎 ($\#\{a_{ij} \mid a_{ij} \neq 0\} \sim n$) である場合にはステップ辺りの計算量が $n$ に比例する計算量ですみ, $n^2$ のオーダーで計算をすることが可能になる.

## 1.1 ヤコビ法

**例 1.** 方程式

$$
\begin{aligned}
0 &= 3x + y + z \\
4 &= x + 3y + z \\
6 &= x + y + 3z
\end{aligned}
$$

が与えられたとき, 各方程式を各々の変数について解き

$$
\begin{aligned}
x &= \frac{1}{3}(0 - y - z) \\
y &= \frac{1}{3}(4 - x - z) \\
z &= \frac{1}{3}(6 - x - y)
\end{aligned}
$$

$x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}$ を適当に決めて (例えば $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}) := (0, 0, 0)$) $x^{(1)}, y^{(1)}, z^{(1)}$ を

$$
\begin{aligned}
x^{(1)} &= \frac{1}{3}(0 - y^{(0)} - z^{(0)}) = 0 \\
y^{(1)} &= \frac{1}{3}(4 - x^{(0)} - z^{(0)}) = \frac{4}{3} \\
z^{(1)} &= \frac{1}{3}(6 - x^{(0)} - y^{(0)}) = 2
\end{aligned}
$$

とし, 以下同様に

$$
\begin{aligned}
x^{(k)} &= \frac{1}{3}(0 - y^{(k-1)} - z^{(k-1)}) \\
y^{(k)} &= \frac{1}{3}(4 - x^{(k-1)} - z^{(k-1)}) \\
z^{(k)} &= \frac{1}{3}(6 - x^{(k-1)} - y^{(k-1)})
\end{aligned}
$$

で順次 $x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}$ を計算していけば解に近付く事がある. 実際, 今の場合を計算すれば

```
[ k]       x      y      z
[ 0]   0.000  0.000  0.000
[ 1]   0.000  1.333  2.000
[ 2]  -1.111  0.667  1.556
[ 3]  -0.741  1.185  2.148
[ 4]  -1.111  0.864  1.852
[ 5]  -0.905  1.086  2.082
[ 6]  -1.056  0.941  1.940
[ 7]  -0.960  1.039  2.038
[ 8]  -1.026  0.974  1.974
[ 9]  -0.983  1.017  2.017
[10]  -1.012  0.988  1.988
[11]  -0.992  1.008  2.008
[12]  -1.005  0.995  1.995
[13]  -0.997  1.003  2.003
[14]  -1.002  0.998  1.998
[15]  -0.998  1.002  2.002
```

```
[16]  -1.001  0.999  1.999
[17]  -0.999  1.001  2.001
[18]  -1.000  1.000  2.000
[19]  -1.000  1.000  2.000
```

となり, 解 $(x, y, z) = (-1, 1, 2)$ に近付いている事が見える.

上の例を一般的な形にする. まず $\mathbf{A}$ を対角成分 $\mathbf{D} = (d_{ij})$, 下三角行列 $\mathbf{E} = (e_{ij})$, 上三角行列 $\mathbf{F} = (f_{ij})$ に分解する. 即ち

$$d_{ij} := \begin{cases} a_{ij} & \text{if } i > j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad e_{ij} := \begin{cases} a_{ij} & \text{if } i = j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad f_{ij} := \begin{cases} a_{ij} & \text{if } i < j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

(特に $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{E} + \mathbf{F}$).

$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ を各々各変数について解くということは対角成分を除いて移項し, 解く変数の係数で辺々割ってやればよい. この操作を行列で表現すれば

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

この式を用いて

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

不動点定理より, $\Phi_J$ が縮小写像であれば, 即ち, 適当なノルムで

$$\|\Phi_J(\mathbf{x}) - \Phi_J(\mathbf{y})\| < \rho\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \qquad (\rho < 1)$$

を満たすものが存在すれば $\mathbf{x}^{(k)}$ が収束する事が言える. また, この時

**命題 1.** $\Phi_J$ の不動点は方程式 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の解.

であるからその収束先が求める解となる. これを**ヤコビ法**という.

*Proof of 命題 1.* $\mathbf{x}$ を $\Phi_J$ の不動点とする (即ち $\Phi_J(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$). この時,

$$\begin{aligned} \mathbf{x} = \Phi_J(\mathbf{x}) \quad &\Leftrightarrow \quad \mathbf{x} = -\mathbf{D}^{-1}\{(\mathbf{E} + \mathbf{F})\mathbf{x} + \mathbf{b}\} \\ &\Leftrightarrow \quad \mathbf{D}\mathbf{x} = -(\mathbf{E} + \mathbf{F})\mathbf{x} + \mathbf{b} \\ &\Leftrightarrow \quad (\mathbf{D} + \mathbf{E} + \mathbf{F})\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ &\Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{aligned}$$

□

アルゴリズムを具体的に書けば次の様になる ($x$ の値を操作する為, 計算の前に $y$ に退避させている事に注意せよ):

**ヤコビ法**

1. $\mathbf{x}$ に $\mathbf{b}$ を代入する.
2. 次を繰り返す
   (a) $\mathbf{y}$ に $\mathbf{x}$ を代入する.[a]
   (b) 次を $i = 1, 2, \ldots, n$ の間繰り返す.
      i. $x[i]$ に $b[i] - \sum_{j \neq i} a_{ij} y[j]$ を代入する
      ii. $x[i]$ を $a_{ii}$ で割る.

[a]退避させておかないと例えば $x[2]$ の計算に使う $x[1]$ の値が変わる.

**注意** $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ が一意解を持つ方程式 (即ち $\mathbf{A}$ が正則) であっても $\Phi_J$ が縮小写像であるとは限らない.

**例 2.** 連立方程式

$$\begin{aligned} 1 &= x+2y+2z \\ 0 &= 2x+y+2z \\ -1 &= 2x+2y+z \end{aligned}$$

は一意解 $(x,y,z)=(-1,0,1)$ を持つが, $\Phi_J$ は縮小写像でない, 実際

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= 1-2y^{(k-1)}-2z^{(k-1)} \\ y^{(k)} &= 0-2x^{(k-1)}-2z^{(k-1)} \\ z^{(k)} &= -1-2x^{(k-1)}-2y^{(k-1)} \end{aligned}$$

で定義される数列は発散する.

```
[ k]        x       y        z
[ 0]    0.000   0.000    0.000
[ 1]    1.000   0.000   -1.000
[ 2]    3.000   0.000   -3.000
[ 3]    7.000   0.000   -7.000
[ 4]   15.000   0.000  -15.000
[ 5]   31.000   0.000  -31.000
[ 6]   63.000   0.000  -63.000
[ 7]  127.000   0.000 -127.000
[ 8]  255.000   0.000 -255.000
[ 9]  511.000   0.000 -511.000
```

## 1.2 ヤコビ法 (収束条件)

$\Phi_J$ が縮小写像になるための条件を調べよう. $\mathbf{M} := -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{E}+\mathbf{F})$ と置けば $\Phi_J(\mathbf{x}) = \mathbf{M}\mathbf{x}+\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$ で

$$\|\Phi_J(\mathbf{x})-\Phi_J(\mathbf{y})\| = \|(\mathbf{M}\mathbf{x}+\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b})-(\mathbf{M}\mathbf{y}+\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b})\| = \|\mathbf{M}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\|$$

となるから, $\Phi_J$ が縮小写像であるためには

$$\sup_{\mathbf{z}\neq\mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{M}\mathbf{z}\|}{\|\mathbf{z}\|} < 1$$

なる事が必要十分である. また, 一般に

**定理 1.** 任意の行列 $\mathbf{M}$ と任意の $\varepsilon > 0$ に対し, 次を満たすノルムが存在する;

$$\sup_{\mathbf{z}\neq\mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{M}\mathbf{z}\|}{\|\mathbf{z}\|} < \rho(\mathbf{M})+\varepsilon$$

但し, $\rho(\mathbf{M}) := \max\{\, |\mu| \mid \mu : \mathbf{M}\text{ の固有値 }\}$.

が言えるので, 固有値の絶対値が全て 1 より小であれば $\Phi_J$ は縮小写像となり, ヤコビ法は収束する.

しかし, 行列の固有値を求める事は困難なので, この条件を直接調べる事は実用上ナンセンスである. そこで, 次の十分条件が役に立つ.

まず言葉を定義する.

**定義 1.** 行列 $\mathbf{A}=(a_{ij})$ が対角優位であるとは,

$$|a_{ii}| > \sum_{j:j\neq i} |a_{ij}| \qquad (i=1,2,\ldots,n)$$

なる時に言う.

与えられた行列が対角優位であるか否かは容易に調べる事ができる. そして, 次の定理より, $\mathbf{A}$ が対角優位であることがヤコビ法が収束するための十分条件である事が分る.

**定理 2.** 行列 $\mathbf{A}$ が対角優位であるとき, $\mathbf{M} := -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{E}+\mathbf{F})$ の固有地の絶対値は 1 より小さい.

*Proof.* $\mathbf{M} = (m_{ij})$ の各成分の値は

$$m_{ij} := \begin{cases} 0 & \text{if i=j} \\ -\dfrac{a_{ij}}{a_{ii}} & \text{otherwise} \end{cases}$$

$\mu$ と $\mathbf{x}$ を各々$\mathbf{M}$ の固有値と対応する固有ベクトルとする (即ち $\mu\mathbf{x} = \mathbf{M}\mathbf{x}$). 第 $i$ 成分を比較すれば

$$\mu x_i = \sum_j M_{ij} x_j = -\sum_{j:j\neq i} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j$$

辺々絶対値をとって $|x_i|$ で割れば

$$|\mu| \leq \sum_{j:j\neq i} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} \frac{|x_j|}{|x_i|}$$

特に $|x_i| = \max\{|x_j|\}$ なる様に $i$ を選べば, $\dfrac{|x_j|}{|x_i|} \leq 1$ であるから

$$|\mu| \leq \frac{\sum_{j:j\neq i} |a_{ij}|}{|a_{ii}|}$$

対角優位性より右辺が 1 より小である. □

## 1.3 ガウス・サイデル法

ヤコビ法は, つまり, 原理的には $\mathbf{x}$ を不動点に持つ縮小写像 $\Phi$ を考えている. 逆に言えば, 方程式 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を $\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{x})$ の形に変形し, $\Phi$ が縮小写像で計算可能であれば同様の議論が可能である. 特に,

$$\begin{aligned} & \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ \Leftrightarrow\ & (\mathbf{D}+\mathbf{E}+\mathbf{F})\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ \Leftrightarrow\ & (\mathbf{D}+\mathbf{E})\mathbf{x} = \mathbf{b} - \mathbf{F}\mathbf{x} \\ \Leftrightarrow\ & \mathbf{x} = (\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}\mathbf{b} - (\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}\mathbf{F}\mathbf{x} \end{aligned}$$

であるから, $\Phi_{GS}(\mathbf{x}) := (\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}\mathbf{b} - (\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}\mathbf{F}\mathbf{x}$ とおけば ($\Phi_{GS}$ が縮小写像であれば) 同様の議論が可能である. 一見逆行列の計算 $(\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}$ を含みナンセンスに見えるが, $(\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}$ は下三角行列であるので前進代入により安価に ($n^2$ のオーダーで) 計算できる. 実際 $\mathbf{x}^{(k)} = (\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}\mathbf{b} - (\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}\mathbf{F}\mathbf{x}^{(k-1)}$ を変形すれば

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

であり, $\mathbf{E}$ が対角成分 0 の下三角である事から右辺は一行目から順に計算できる.[1] 漸化式 (1) による反復法を**ガウス・サイデル法**と言う.

具体的にアルゴリズムを書けば:

ガウスサイデル法

1. $\mathbf{x}$ に $\mathbf{b}$ を代入する.
2. 次を繰り返す
   (a) 次を $i = 1, 2, \ldots, n$ の間繰り返す.
      i. $x[i]$ に $b[i] - \sum_{j\neq i} a_{ij} x[j]$ を代入する
      ii. $x[i]$ を $a_{ii}$ で割る.

ヤコビ法にあった”退避”が無くなっている事に注意せよ. 前段の値を使う $\mathbf{F}$ が上三角行列である為,

[1] これは下三角行列の解が前進代入で求められる事と同様の事である. 前進代入とは $(\mathbf{D}+\mathbf{E})\mathbf{x}^{(k)} = \bar{\mathbf{b}} \Leftrightarrow \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{D}^{-1}(\bar{\mathbf{b}} - \mathbf{E}\mathbf{x}^{(k)})$ の右辺を一行目から順に計算しているに他ならない.

上段より順に計算していく分には退避を必要とせず, 計算後の値を用いる. 面白い事にアルゴリズムとしてはむしろガウス・サイデル法の方が簡単であり, かつ下の例に見られるように多くの場合収束も早い.

**例 3.** 再び方程式

$$\begin{aligned} 0 &= 3x + y + z \\ 4 &= x + 3y + z \\ 6 &= x + y + 3z \end{aligned}$$

を考えよう, ヤコビ法のときと同様に, 各方程式を各々の変数について解き

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{3}(0 - y - z) \\ y &= \frac{1}{3}(4 - x - z) \\ z &= \frac{1}{3}(6 - x - y) \end{aligned}$$

$x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}$ を適当に決めて (例えば $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}) := (0, 0, 0)$) $x^{(1)}, y^{(1)}, z^{(1)}$ を

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= \frac{1}{3}(0 - y^{(0)} - z^{(0)}) = 0 \\ y^{(1)} &= \frac{1}{3}(4 - x^{(1)} - z^{(0)}) = \frac{4}{3} \\ z^{(1)} &= \frac{1}{3}(6 - x^{(1)} - y^{(1)}) = \frac{14}{3} \end{aligned}$$

という風に計算し終わった値を使うように変更する, 以下同様に

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= \frac{1}{3}(0 - y^{(k-1)} - z^{(k-1)}) \\ y^{(k)} &= \frac{1}{3}(4 - x^{(k)} - z^{(k-1)}) \\ z^{(k)} &= \frac{1}{3}(6 - x^{(k)} - y^{(k)}) \end{aligned}$$

で順次 $x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}$ を計算していけば解に近付く事がある. 実際, 今の場合を計算すれば

```
[ k]       x      y      z
[ 0]   0.000  0.000  0.000
[ 1]   0.000  1.333  1.556
[ 2]  -0.963  1.136  1.942
[ 3]  -1.026  1.028  1.999
[ 4]  -1.009  1.003  2.002
[ 5]  -1.002  1.000  2.001
[ 6]  -1.000  1.000  2.000
[ 7]  -1.000  1.000  2.000
[ 8]  -1.000  1.000  2.000
[ 9]  -1.000  1.000  2.000
```

と成り, ヤコビ法の時より速く解 $(x, y, z) = (-1, 1, 2)$ に近付いている事が見える.

## 1.4 ガウス・サイデル法 (収束条件)

漸化式の関数は

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

であるから, ヤコビ法のときと同様の議論で $\Phi_{GS}$ が縮小写像であるための必要十分条件は $\mathbf{M} := -(\mathbf{D} + \mathbf{E})^{-1}\mathbf{F}$ の固有値の絶対値が 1 より小なることである.

ヤコビ法のときと同じく, $\mathbf{A}$ が対角優位であることがガウス・サイデル法の収束の十分条件の一つである事が示せる.

**定理 3.** 行列 $\mathbf{A}$ が対角優位であるとき, $\mathbf{M} := -(\mathbf{D} + \mathbf{E})^{-1}\mathbf{F}$ の固有地の絶対値は 1 より小さい.

*Proof.* $\mu$ と $\mathbf{x}$ を各々$\mathbf{M}$ の固有値と対応する固有ベクトルとする (即ち $\mu\mathbf{x} = \mathbf{M}\mathbf{x}$). このとき

$$\begin{aligned}\mathbf{M}\mathbf{x} = \mu\mathbf{x} \quad &\Leftrightarrow \quad -(\mathbf{D}+\mathbf{E})^{-1}\mathbf{F}\mathbf{x} = \mu\mathbf{x} \\ &\Leftrightarrow \quad \mathbf{F}\mathbf{x} + \mu\mathbf{D}\mathbf{x} + \mu\mathbf{E}\mathbf{x} = 0 \\ &\Leftrightarrow \quad -\mu\mathbf{D}\mathbf{x} = \mathbf{F}\mathbf{x} + \mu\mathbf{E}\mathbf{x}\end{aligned}$$

上式の第 $i$ 成分を考えれば, $\mathbf{D}$, $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$ の定義より

$$-\mu a_{ii}x_i = \mu \sum_{j:j>i} a_{ij}x_j + \sum_{j:j<i} a_{ij}x_j$$

辺々絶対値をとって $|x_i|$ で割れば

$$|\mu||a_{ii}| \leq |\mu| \sum_{j:j>i} |a_{ij}|\frac{|x_j|}{|x_i|} + \sum_{j:j<i} |a_{ij}|\frac{|x_j|}{|x_i|}$$

特に $|x_i| = \max\{|x_j|\}$ なる様に $i$ を選べば, $\dfrac{|x_j|}{|x_i|} \leq 1$ であるから

$$|\mu||a_{ii}| \leq |\mu| \sum_{j:j>i} |a_{ij}| + \sum_{j:j<i} |a_{ij}|$$

$\sum_{j:j<i} |a_{ij}| = 0$ とすれば先と同様にして $|\mu| < 1$ を得る. $\sum_{j:j<i} |a_{ij}| > 0$ と仮定すれば, 対角優位性より

$$|\mu||a_{ii}| \leq |\mu| \sum_{j:j\neq i} |a_{ij}| + (1-|\mu|) \sum_{j:j<i} |a_{ij}| < |\mu||a_{ii}| + (1-|\mu|) \sum_{j:j<i} |a_{ij}|$$

仮定より $0 < 1 - |\mu|$ を得る. □