7-4 SOR法（反復法）

ヤコビ法

連立1次方程式

$$
\begin{aligned}
5x_1 + 4x_2 &= 13 \\
2x_1 + 3x_2 &= 8
\end{aligned}
\tag{7.37}
$$

を解く

（解は $(x_1, x_2) = (1, 2)$）

ヤコビ法

式 (7.37) を変形

$$x_1 = (1/5)\,(13 - 4\,x_2) = f_1(x_2)$$
$$x_2 = (1/3)\,(8 - 2\,x_1) = f_2(x_1) \tag{7.38}$$

ヤコビ法

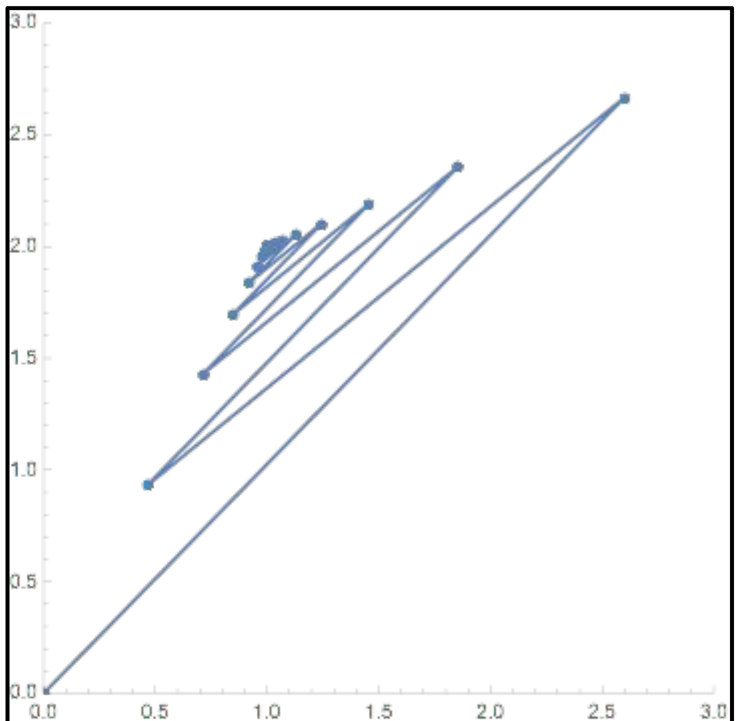
式 (7.38) をもとに漸化式を作る

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= (1/5)\,(13 - 4\,x_2^{(k)}) = f_1(x_2^{(k)}) \\
x_2^{(k+1)} &= (1/3)\,(8 - 2\,x_1^{(k)}) = f_2(x_1^{(k)})
\end{aligned}
\qquad (7.39)
$$

初期値 $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$ を与え、漸化式 (7.39) により、$(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$ $(k = 1, 2, 3, \dots)$ を求める

ヤコビ法

初期値を (0, 0) とし、漸化式 (7.39) で求めた点列 $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$ の軌跡 ($k = 0, \ldots, 41$)



反復法と直接法

- 反復法 (iterative method):
    - 漸化式による反復計算により解の近似値を求める
        - ヤコビ（の反復）法 (Jacobi’s (iterative) method)
        - ガウス･ザイデル法 (Gauss-Seidel method)
        - SOR法 (<u>s</u>uccessive <u>o</u>ver<u>r</u>elaxation method)

反復法と直接法

- 直接法 (direct method):
  - 拡大係数行列を直接変形し、有限回の計算で解を求める
    - ガウスの消去法 (Gaussian elimination)
    - *LU*分解の方法 (*LU* decomposition based method)

ヤコビ法における解への収束

漸化式 (7.39) を以下のように書き換える

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -4/5 \\ -2/3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 13/5 \\ 8/3 \end{pmatrix} \tag{7.40}$$

一方、解 $(x_1, x_2) = (1, 2)$ は次式を満たす

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 13/5 \\ 8/3 \end{pmatrix} \tag{7.41}$$

ヤコビ法における解への収束

式 (7.40) から (7.41) を両辺引くと、次式を得る

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} - 1 \\ x_2^{(k+1)} - 2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} \qquad (7.42)$$

k+1回目の反復値と真の解との誤差

*k*回目の反復値と真の解との誤差

これは反復値の誤差の漸化式を表す

ヤコビ法における解への収束

さらに、次式が成り立つ

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} x_1^{(0)} - 1 \\ x_2^{(0)} - 2 \end{pmatrix} \tag{7.43}$$

*k*回目の反復値と真の解との誤差

初期値と真の解との誤差

反復解の収束と固有値･固有ベクトルの関係

M の特性多項式: $\chi_M(\lambda) = \lambda^2 - 8/15$ より

$\chi_A(\lambda) = 0$ を解くと、M の2つの固有値は

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{8}{15}}, \quad \lambda_2 = -\sqrt{\frac{8}{15}}$$

λ_i に属する固有ベクトルを $\boldsymbol{u}_i$ とおくと

$$\boldsymbol{u}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{6} \\ -\sqrt{5} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{6} \\ \sqrt{5} \end{pmatrix}$$

反復解の収束と固有値・固有ベクトルの関係

$\boldsymbol{u}_1$ と $\boldsymbol{u}_2$ は1次独立なので、(7.43) の右辺のベクトルは、任意の $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}$ に対し、$\boldsymbol{u}_1$と$\boldsymbol{u}_2$の1次結合で表される

$$\begin{pmatrix} x_1^{(0)} - 1 \\ x_2^{(0)} - 2 \end{pmatrix} = c_1 \boldsymbol{u}_1 + c_2 \boldsymbol{u}_2 \tag{7.45}$$

反復解の収束と固有値･固有ベクトルの関係

よって、式 (7.43) は☞ $$\begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} x_1^{(0)} - 1 \\ x_2^{(0)} - 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} = M^k(c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2) = c_1\lambda_1^k\boldsymbol{u}_1 + c_2\lambda_2^k\boldsymbol{u}_2 \tag{7.46}$$

と表される

さらに、$|\lambda_1| < 1$, $|\lambda_2| < 1$ より

$$\lim_{k\to\infty} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} - 1 \\ x_2^{(k)} - 2 \end{pmatrix} = \lim_{k\to\infty}(c_1\lambda_1^k\boldsymbol{u}_1 + c_2\lambda_2^k\boldsymbol{u}_2) = \mathbf{0} \tag{7.47}$$

反復解の収束と固有値･固有ベクトルの関係

- この方程式では、任意の初期値に対し、$x_1^{(k)}, x_2^{(k)}$ が解に収束する
- 収束するためのポイントは行列 M のすべての固有値の絶対値が1より小さいこと

ガウス･ザイデル法

- ヤコビ法の反復式 (7.39) を少し修正する

$x_1^{(k+1)} = (1/5)\,(13 - 4\,x_2^{(k)}) = f_1(x_2^{(k)})$

$x_2^{(k+1)} = (1/3)\,(8 - 2\,x_1^{(\underline{k+1})}) = f_2(x_1^{(\underline{k+1})})$

- 上の漸化式で求めた $x_1^{(k+1)}$ をすぐに下の漸化式に使う

ガウス･ザイデル法

- 反復計算の順序に制限が加わる

$$x_1^{(k+1)} = (1/5)\,(13 - 4\,x_2^{(k)}) = f_1(x_2^{(k)})$$

$$x_2^{(k+1)} = (1/3)\,(8 - 2\,x_1^{(\underline{k+1})}) = f_2(x_1^{(\underline{k+1})}) \qquad (7.48)$$

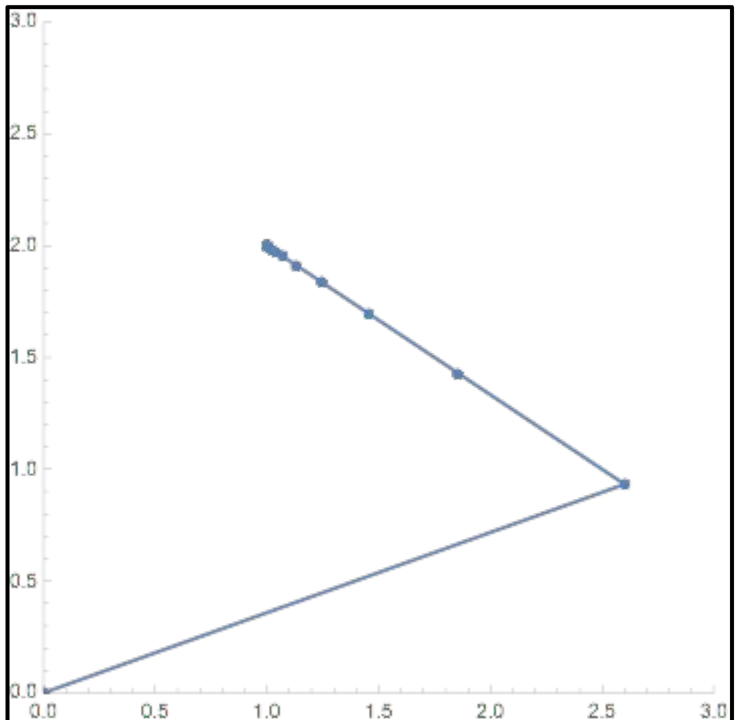
より

$$x_2^{(0)} \rightarrow x_1^{(1)} \rightarrow x_2^{(1)} \rightarrow x_1^{(2)} \rightarrow x_2^{(2)} \rightarrow x_1^{(3)} \rightarrow x_2^{(3)} \rightarrow \dots$$

- $x_1^{(0)}$ は不要

ガウス･ザイデル法

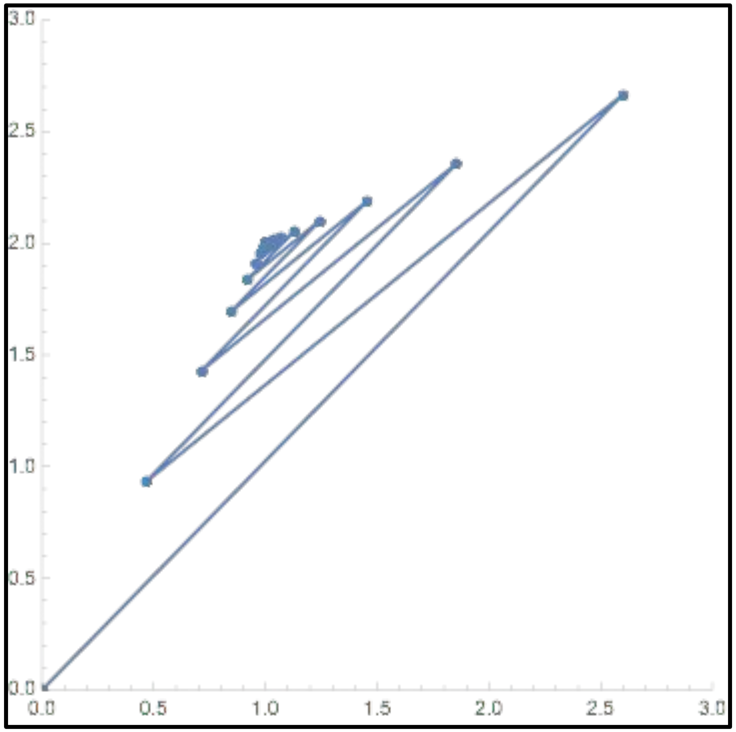
初期値を $(0, x_2^{(0)}) = (0, 0)$ とし、漸化式 (7.48) で求めた点列 $(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})$ の軌跡 $(k = 0, \ldots, 25)$

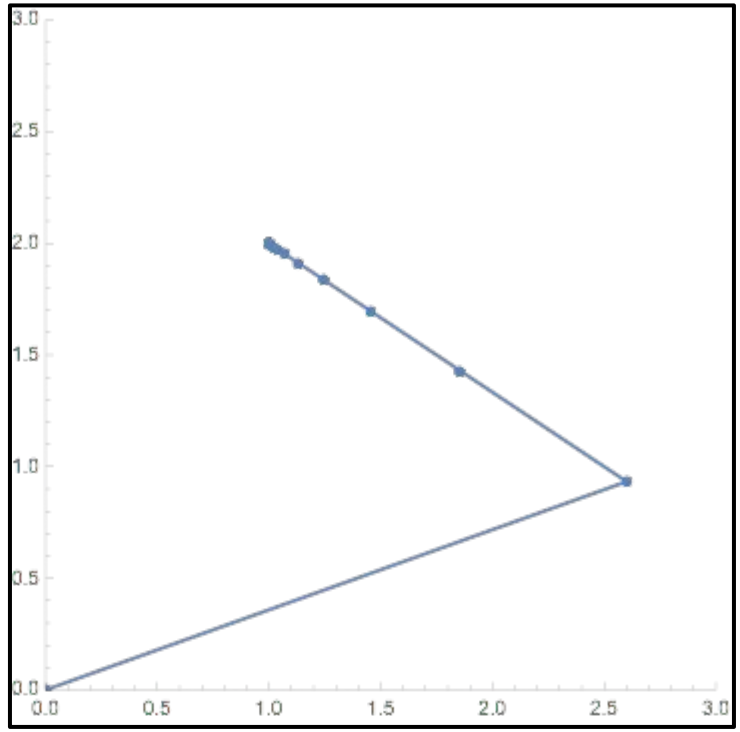


ガウス・ザイデル法

- 解への収束がヤコビ法よりもほぼ2倍速い
  - $x_1^{(k+1)} = f_1(x_2^{(k)}) = f_1(f_2(x_1^{(k)}))$
  - $x_2^{(k+1)} = f_2(x_1^{(k+1)}) = f_2(f_1(x_2^{(k)}))$
- 一方、ヤコビ法では
  - $x_1^{(k+2)} = f_1(x_2^{(k+1)}) = f_1(f_2(x_1^{(k)}))$
  - $x_2^{(k+2)} = f_2(x_1^{(k+1)}) = f_2(f_1(x_2^{(k)}))$

ヤコビ法とガウス・ザイデル法の収束の比較





SOR法

- ガウス･ザイデル法の漸化式にパラメータωを加える

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \frac{\omega}{5}(13 - 4x_2^{(k)}) + (1-\omega)x_1^{(k)} \\
&= \omega f_1(x_2^{(k)}) + (1-\omega)x_1^{(k)} \\
x_2^{(k+1)} &= \frac{\omega}{3}(8 - 2x_1^{(k+1)}) + (1-\omega)x_2^{(k)} \\
&= \omega f_2(x_1^{(k+1)}) + (1-\omega)x_2^{(k)}
\end{aligned}
\tag{7.49}
$$

SOR法

- ω および $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}$ を定めれば、$x_1^{(1)} \to x_2^{(1)} \to x_1^{(2)} \to x_2^{(2)} \to x_1^{(3)} \to x_2^{(3)} \to \ldots$ と定まる
- k → ∞ で $x_1^{(k)}$, $x_2^{(k)}$ が収束すれば、それらが求める解
- ω = 1 のとき、ガウス・ザイデル法に一致する
- ω: 加速係数 (acceleration parameter)

ガウス･ザイデル法に対するSOR法のアイデア

- 漸化式 (7.49) を書き換えると

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)} &= \omega \{ f_1(x_2^{(k)}) - x_1^{(k)} \} \\
x_2^{(k+1)} - x_2^{(k)} &= \omega \{ f_2(x_1^{(k+1)}) - x_2^{(k)} \}
\end{aligned}
\tag{7.50}
$$

- 上の漸化式で $\omega = 1$ とおくとガウス･ザイデル法

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)} &= f_1(x_2^{(k)}) - x_1^{(k)} \\
x_2^{(k+1)} - x_2^{(k)} &= f_2(x_1^{(k+1)}) - x_2^{(k)}
\end{aligned}
\tag{7.51}
$$

ガウス・ザイデル法に対するSOR法のアイデア

- 左辺: 反復値の変化量 ($k \to k+1$) を表す
- 右辺: 変化量の値を表す

$$x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)} = f_1(x_2^{(k)}) - x_1^{(k)}$$

$$x_2^{(k+1)} - x_2^{(k)} = f_2(x_1^{(k+1)}) - x_2^{(k)}$$

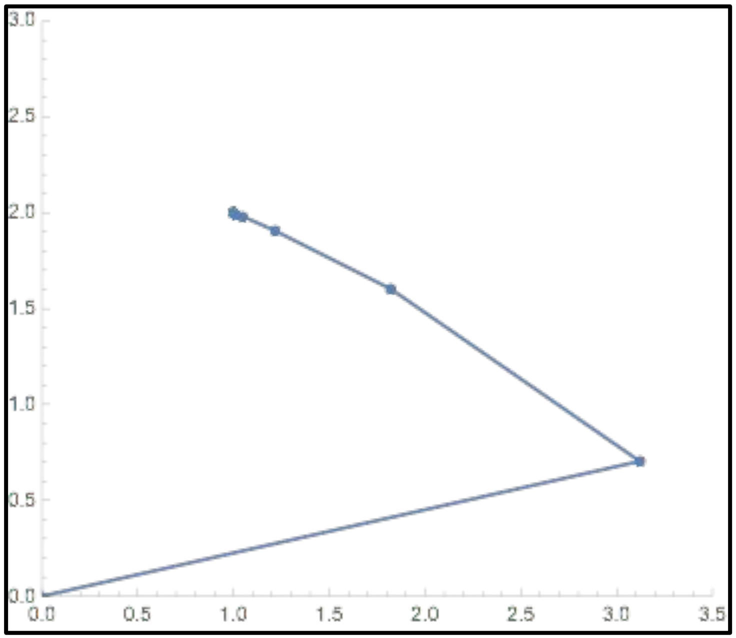
- SOR法では ω をかけて反復を「加速」する

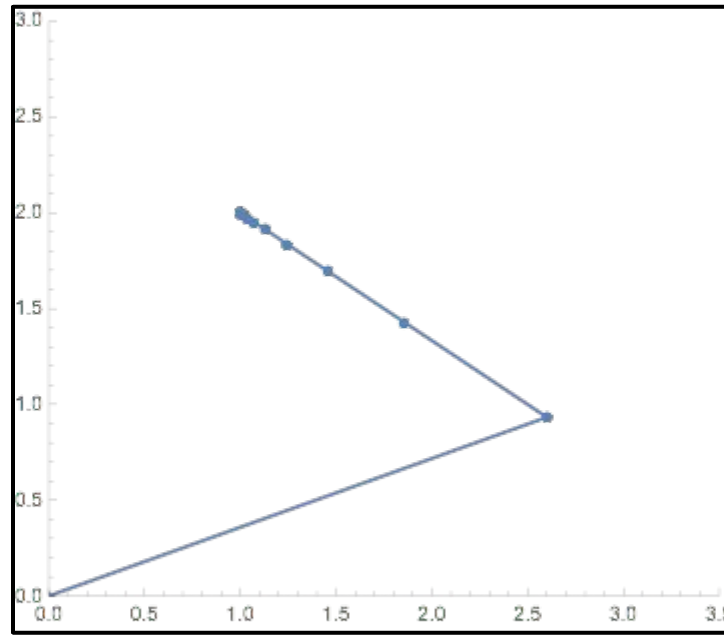
$$x_1^{(k+1)} - x_1^{(k)} = \omega \{ f_1(x_2^{(k)}) - x_1^{(k)} \}$$

$$x_2^{(k+1)} - x_2^{(k)} = \omega \{ f_2(x_1^{(k+1)}) - x_2^{(k)} \}$$

SOR法の収束

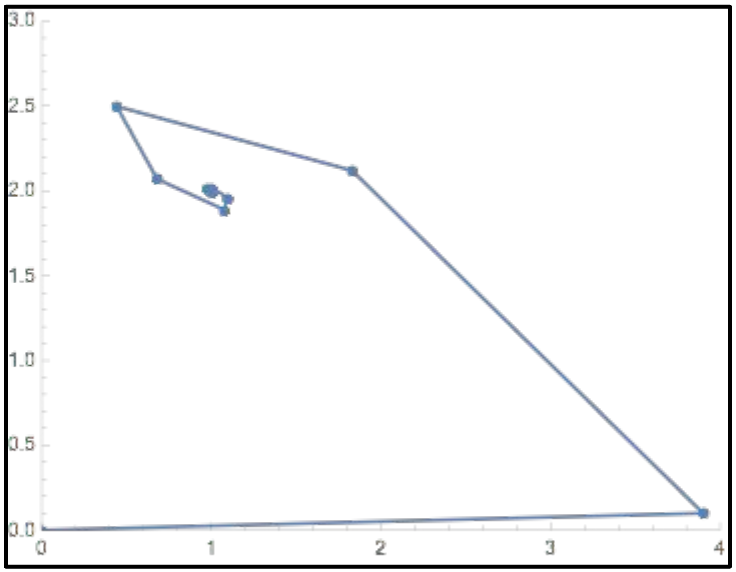
ω = 1.2 の場合（右はガウス･ザイデル法）

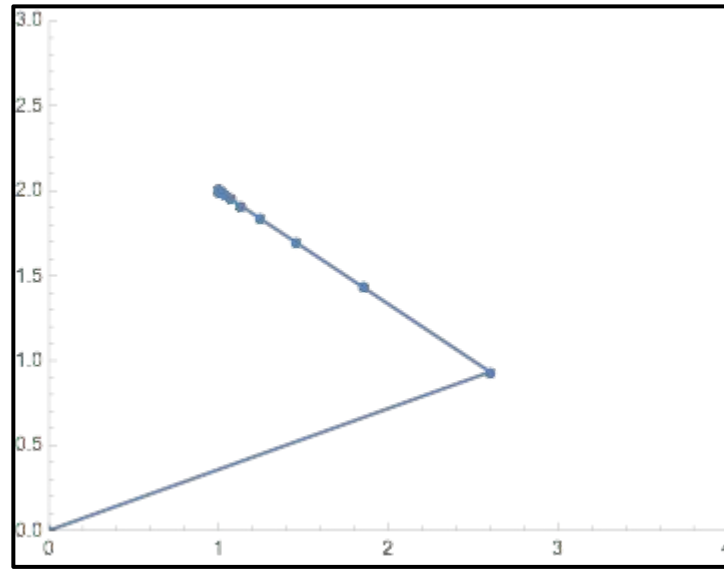




SOR法の収束

ω = 1.5 の場合（右はガウス・ザイデル法）





SOR法の収束性

- ω の値によって収束の速さが変化する
- 解が収束するための必要条件は $0 < \omega < 2$
- 係数行列が正定値対称行列であれば $1 < \omega < 2$ の範囲に最適値が存在する
  （$A \in \mathrm{R}^{n \times n}$: 実対称行列が正定値⇔任意の $\mathbf{0} \neq \boldsymbol{x} \in \mathrm{R}^{n}$ に対し $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x} > 0$）
- ω の最適値は問題ごとに異なる

一般の連立1次方程式の場合

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \quad \text{(7.52)'}$$

一般の連立1次方程式の場合：ヤコビ法

式 (7.52) を変形する

$$x_1 = \frac{1}{a_{1,1}}\{y_1 - (a_{1,2}x_2 + a_{1,3}x_3 + \cdots + a_{1,N}x_N)\}$$

$$x_2 = \frac{1}{a_{2,2}}\{y_2 - (a_{2,1}x_1 + a_{2,3}x_3 + \cdots + a_{2,N}x_N)\}$$

$$\cdots\cdots$$

$$x_i = \frac{1}{a_{i,i}}\{y_i - (a_{i,1}x_1 + a_{i,2}x_2 + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1} + a_{i,i+1}x_{i+1} + \cdots + a_{i,N}x_N)\}$$

$$\cdots\cdots$$

$$x_N = \frac{1}{a_{N,N}}\{y_N - (a_{N,1}x_1 + a_{N,2}x_2 + \cdots + a_{N,N-1}x_{N-1})\} \qquad (7.53)$$

一般の連立1次方程式の場合:ヤコビ法

漸化式を構成する

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{1,1}}\{y_1 - (a_{1,2}x_2^{(k)} + a_{1,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{1,N}x_N^{(k)})\} \\
x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{2,2}}\{y_2 - (a_{2,1}x_1^{(k)} + a_{2,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2,N}x_N^{(k)})\} \\
&\cdots\cdots \\
x_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{i,i}}\{y_i - (a_{i,1}x_1^{(k)} + a_{i,2}x_2^{(k)} + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \cdots + a_{i,N}x_N^{(k)})\} \\
&\cdots\cdots \\
x_N^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{N,N}}\{y_N - (a_{N,1}x_1^{(k)} + a_{N,2}x_2^{(k)} + \cdots + a_{N,N-1}x_{N-1}^{(k)})\}
\end{aligned}
\tag{7.54}
$$

一般の連立1次方程式の場合：ヤコビ法

- 初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ は特に候補がなければ $(0, \ldots, 0)^\mathrm{T}$ などのように設定する
- 漸化式 (7.54) を用いて $\boldsymbol{x}^{(\mathrm{k})} = (x_1^{(k)}, \ldots, x_N^{(k)})^\mathrm{T}$ を反復計算する
- 反復計算を繰り返して $\boldsymbol{x}^{(\mathrm{k})}$ が収束判定条件を満たしたところで、$\boldsymbol{x}^{(\mathrm{k})}$ を方程式の解として出力する
- 収束判定条件は後述

一般の連立1次方程式の場合：ガウス・ザイデル法

ヤコビ法の漸化式 (7.54) を変形する

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{1,1}}\{y_1 - (a_{1,2}x_2^{(k)} + a_{1,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{1,N}x_N^{(k)})\} \\
x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{2,2}}\{y_2 - (a_{2,1}\boxed{x_1^{(k+1)}} + a_{2,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2,N}x_N^{(k)})\} \\
x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{3,3}}\{y_3 - (a_{3,1}\boxed{x_1^{(k+1)}} + a_{3,2}\boxed{x_2^{(k+1)}} + a_{3,4}x_4^{(k)} + \cdots + a_{3,N}x_N^{(k)})\} \\
&\cdots\cdots \\
x_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{i,i}}\{y_i - (a_{i,1}\boxed{x_1^{(k+1)}} + a_{i,2}\boxed{x_2^{(k+1)}} + a_{i,3}\boxed{x_3^{(k+1)}} + \cdots \\
&\quad + a_{i,i-1}\boxed{x_{i-1}^{(k+1)}} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \cdots + a_{i,N}x_N^{(k)})\} \\
&\cdots\cdots \\
x_N^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{N,N}}\{y_N - (a_{N,1}\boxed{x_1^{(k+1)}} + a_{N,2}\boxed{x_2^{(k+1)}} + \cdots + a_{N,N-1}\boxed{x_{N-1}^{(k+1)}})\}
\end{aligned} \qquad (7.55)
$$

一般の連立1次方程式の場合：SOR法

ガウス・ザイデル法の漸化式 (7.55) を変形する

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \frac{\omega}{a_{1,1}}\{y_1 - (a_{1,2}x_2^{(k)} + a_{1,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{1,N}x_N^{(k)})\} + (1-\omega)x_1^{(k)} \\
x_2^{(k+1)} &= \frac{\omega}{a_{2,2}}\{y_2 - (a_{2,1}x_1^{(k+1)} + a_{2,3}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2,N}x_N^{(k)})\} + (1-\omega)x_2^{(k)} \\
x_3^{(k+1)} &= \frac{\omega}{a_{3,3}}\{y_3 - (a_{3,1}x_1^{(k+1)} + a_{3,2}x_2^{(k+1)} + a_{3,4}x_4^{(k)} + \cdots + a_{3,N}x_N^{(k)})\} + (1-\omega)x_3^{(k)} \\
&\cdots\cdots \\
x_i^{(k+1)} &= \frac{\omega}{a_{i,i}}\{y_i - (a_{i,1}x_1^{(k+1)} + a_{i,2}x_2^{(k+1)} + a_{i,3}x_3^{(k+1)} + \cdots \\
&\quad + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k)} + \cdots + a_{i,N}x_N^{(k)})\} + (1-\omega)x_i^{(k)} \\
&\cdots\cdots \\
x_N^{(k+1)} &= \frac{\omega}{a_{N,N}}\{y_N - (a_{N,1}x_1^{(k+1)} + a_{N,2}x_2^{(k+1)} + \cdots + a_{N,N-1}x_{N-1}^{(k+1)})\} + (1-\omega)x_N^{(k)}
\end{aligned}
\tag{7.56}
$$

収束判定条件

0 < ε << 1 に対し

$$\sum_{i=1}^{N} \left| x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)} \right| < \varepsilon \sum_{i=1}^{N} \left| x_i^{(k+1)} \right| \qquad (7.57)$$

参考:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left| x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)} \right| < \varepsilon \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left| x_i^{(k+1)} \right| \qquad (7.58)$$

（左辺は反復解の各成分の変化量の平均値、右辺は反復解の成分の平均値）

その他の収束判定条件

ε << 1 に対し

$$\max_{1 \le i \le N} \left| x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)} \right| < \varepsilon \max_{1 \le i \le N} \left| x_i^{(k+1)} \right| \qquad (7.59)$$

（左辺は反復解の各成分の変化量の最大値、右辺は反復解の成分の最大値）

ヤコビ法のアルゴリズム

- 入力: $N, A = (a_{ij}), y_1, \ldots y_N, 0 < \varepsilon << 1$

1. 初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, \ldots, x_N^{(0)})^T$ を設定する
2. while (1)
   a. sum $\leftarrow$ 0; error $\leftarrow$ 0;
   b. for $i \in [1..N]$ do
      i. for $j \in [1..\ i - 1]$ do $y_i \leftarrow y_i - a_{ij}x_j$;
      ii. for $j \in [i - 1\ ..\ N]$ do $y_i \leftarrow y_i - a_{ij}x_j$;
      iii. $z_i \leftarrow y_i / a_{ii}$;
      iv. sum $\leftarrow$ sum + $|z_i|$; error $\leftarrow$ error $+| z_i - x_i |$;

ヤコビ法のアルゴリズム

c. if (error < ε × sum) then break;

d. for $i \in [1..N]$ do $x_i \leftarrow z_i$;

2. return $\boldsymbol{z} = (z_1, \ldots, z_N)^T$;

SOR法のアルゴリズム

- 入力: N, $A = (a_{ij})$, $y_1, \dots y_N$, $0 < \varepsilon << 1$, ω

1. 初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, \dots, x_N^{(0)})^T$ を設定する
2. while (1)
    a. sum ← 0; error ← 0;
    b. for $i \in [1..N]$ do
        i. for $j \in [1..\ i - 1]$ do $y_i \leftarrow y_i - a_{ij}x_j$;
        ii. for $j \in [i - 1\ ..\ N]$ do $y_i \leftarrow y_i - a_{ij}x_j$;
        iii. new_x ← $(\omega \times y_i)/\ a_{ii} + (1 - \omega)\ x_i$;
        iv. sum ← sum + |new_x|;

SOR法のアルゴリズム

v. error ← error +|new_x-x_i|; x_i ← new_x;

c. if (error < ε × sum) then break;

3. return $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_N)^T$;

各解法の特徴: 解への収束

- 漸化式 : $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = M\,\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{c}$ と表される
- $\boldsymbol{x}^{(k)}$ が収束する ⇔ M のすべての固有値の絶対値 < 1
- M の固有値をあらかじめ知ることは一般に難しいので、与えられた係数行列の形に対して漸化式が収束する十分条件が調べられている
- ここでは、ひとまず反復法を試してみて、うまくいかなければ次の手を考えるという立場

各解法の特徴: ωの決定

- ωの最適値がわかれば、反復解の収束が速くなる
- しかし、与えられた連立1次方程式に対してωの最適値を求めることは一般に難しい
- 連立1次方程式を1回解くだけの場合は、とりあえずガウス･ザイデル法を使ってみる
- 一方、右辺の値を何度も変えて解く場合は、予備的な実験でωの値を推測することも有効

直接法か、それとも反復法か？

- どちらの系統の方法がよいとは一概には言えない
- 係数行列の形、問題の規模、解の精度、メモリ量などに依存
- 直接法：原理的にはあらゆる連立1次方程式に適用可能
- 反復法：適用可能な連立1次方程式は限られるが、メモリ使用量を抑えることが可能
- 直接法、反復法とも、ここで取り上げた方法以外にも様々な方法が開発されている

第7章のまとめ

- 連立1次方程式の数値解法
  - 直接法
    - ガウスの消去法
    - *LU*分解
  - 反復法
    - ヤコビ法
    - ガウス・ザイデル法
    - SOR法

次回の内容

- 第2章: 方程式の根
- 第3章: 曲線の推定
  - 3-1: 曲線の推定
  - 3-2: ラグランジュ(Lagrange)補間