数値計算

京都大学大学院情報学研究科
大木 健太郎
連絡先： ohki@i.kyoto-u.ac.jp

第３回
- Gaussの消去法
- 反復法

注意

- 行列(ベクトル)の添字は，その行列(ベクトル)の各要素を表す場合と，異なる行列(ベクトル)を表す場合があります．
定義に注意してください．

ベクトルの要素

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \underline{y_1, y_2} \in \mathbb{R}^n$$

ベクトル

本日の内容

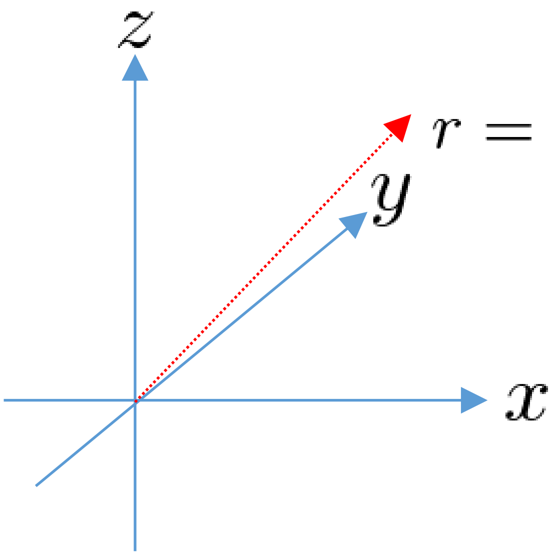
- 連立一次方程式の例：3次元情報の復元
- 連立一次方程式の数値解法（1）
  - Gaussの消去法
  - 誤差評価
- 連立一次方程式の数値解法（2）
  - 反復法

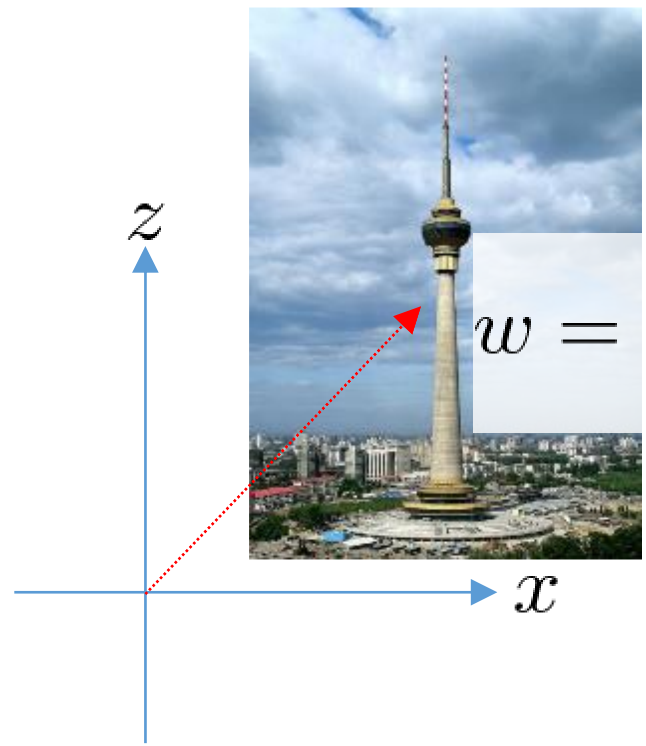
3次元情報とカメラ画像

- カメラの画像
  - 3次元の情報を2次元情報として取得

$$w = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} r$$

$$r = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

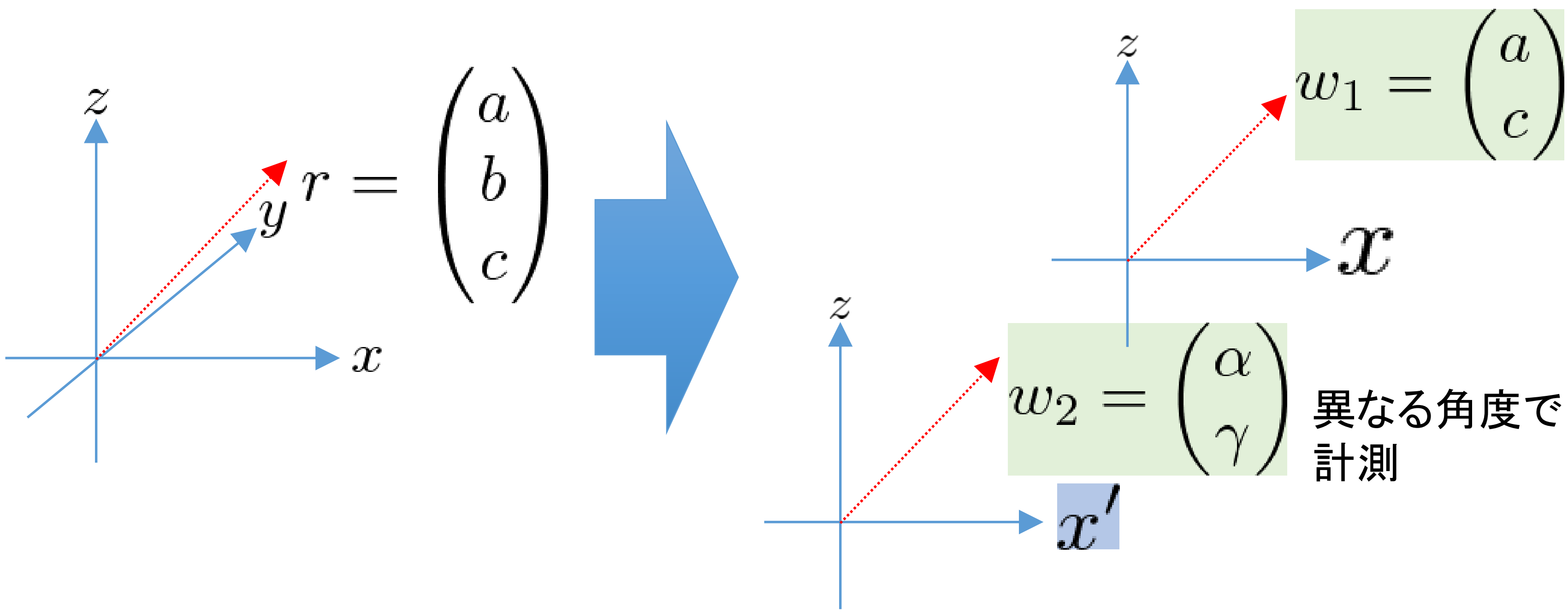




$$w = \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}$$

3次元情報の復元:ヒトの場合

- ヒトの画像処理能力
  - 視差を利用して，3次元の情報を左右の眼から（視差を利用して）2つの2次元情報として取得



3次元情報の復元：数理的ポイント

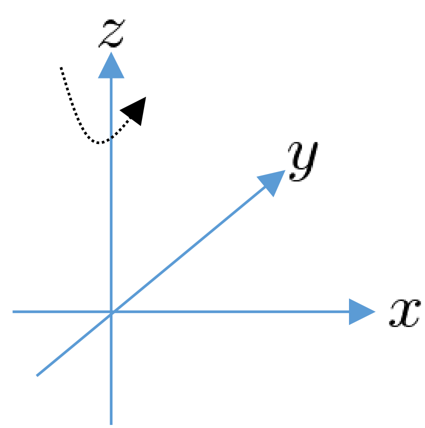
- 3次元を2次元にする
- 座標を回転してから3次元を2次元にする

$$w_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} r,$$

$$w_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} r$$

$$= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} r$$

z 軸回りに θ だけ回転



3次元情報の復元：問題設計

- 3次元情報の復元問題は，
  連立一次方程式の求解問題に帰着

$$A'r = w',\ A' \in \mathbb{R}^{4\times 3},\ r \in \mathbb{R}^3,\ w' \in \mathbb{R}^4$$

$$A' = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},\ w' = \begin{bmatrix} a \\ c \\ \alpha \\ c \end{bmatrix}$$

※　2行目と4行目は全く同じ方程式なので，4行目を削除

3次元情報の復元：連立一次方程式

- 3次元情報の復元問題：連立一次方程式

$$Ar = w, \;\; A \in \mathbb{R}^{3\times 3}, \;\; w, r \in \mathbb{R}^3$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \end{bmatrix}, \quad w = \begin{bmatrix} a \\ c \\ \alpha \end{bmatrix}$$

$$r = A^{-1} w$$

ヒトは，個人固有の逆行列を使って3次元情報を取得している

コメント

- 座標回転は，適切に選ぶことで逆行列の存在を保証
- ズームインやズームアウトは，行列の正則性を変えない
  - 全く回転しなければ，何枚撮っても3次元情報は復元できない
- 例のように，一般には縦長の長方行列になるが，その場合は擬似逆行列を求める

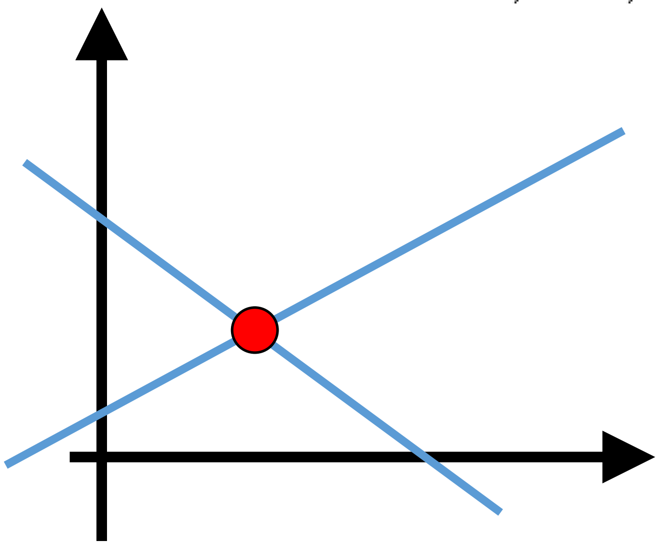
本日の内容

- ❖連立一次方程式の例：3次元情報の復元
- ❖連立一次方程式の数値解法（1）
  - ❖ Gaussの消去法
  - ❖ 誤差評価
- ❖連立一次方程式の数値解法（2）
  - ❖ 反復法

連立一次方程式の数値解法

$$Ax = b,$$

$$A \in \mathbb{R}^{n\times n},\ \ x, b \in \mathbb{R}^n,\ \ \det(A) \neq 0$$



n-1 次元の超平面の交点を求める問題
（2次元の場合は直線の交点を求める問題）

厳密解: $x = A^{-1}b$

逆行列をどうやって求めるか？

逆行列

- 逆行列の公式

$$\det(A) \neq 0 \;\Rightarrow\; A^{-1} = \frac{1}{\det(A)}\mathrm{adj}(A)$$

定義通りに行列式を計算すると, $O(n \times n!)$ 回の計算

計算量が非常に大きい

20次元の行列の計算量 : $20! = 10^{\log(20!)} \approx 10^{18}$

1秒間に 10^9 回計算して, 30年以上必要

$O(n \times n!)$: n を大きくすると $n \times n!$ に比例するという記号

連立一次方程式の数値解法

- 直接法
  - Gaussの消去法
  - LU分解
- 間接法
  - 反復解法
- 混合法
  - 共役勾配法

今日の内容

次回の内容(予定)

Gaussの消去法

- Gaussの消去法: 前進消去 と 後退代入
- 連立一次方程式 $Ax = b$ の解法(三次元)

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

$a_{11} \neq 0$ ならば, 次の行列を用意

$$M_1 := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}}, \quad m_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}}$$

Gaussの消去法: 前進消去

M_1 を $Ax = b$ の両辺に左からかける

$$M_1 A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} - a_{11}m_{21} & a_{22} - a_{12}m_{21} & a_{23} - a_{13}m_{21} \\ a_{31} - a_{11}m_{31} & a_{32} - a_{12}m_{31} & a_{33} - a_{13}m_{31} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \end{bmatrix} =: A^{(2)}$$

$$b^{(2)} := M_1 b$$

$$A^{(2)}x = b^{(2)}$$

$a_{22}^{(2)} = 0$ ならば，3行目と入れ替える

Gaussの消去法:前進消去

M_2 を $A^{(2)}x = b^{(2)}$ の両辺に左からかける

$$M_2 := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -m_{32} & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{32} = \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$$

$$M_2 A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} - a_{22}^{(2)} m_{32} & a_{33}^{(2)} - a_{23}^{(2)} m_{32} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \end{bmatrix} =: \underline{A^{(3)}}, \quad b^{(3)} := M_2 b^{(2)}$$

右上三角行列

$$\Rightarrow \quad A^{(3)}x = b^{(3)}$$

Gaussの消去法:後退代入

- 3行目から逆に解いていく

$$x_3 = b_3^{(3)} / a_{33}^{(3)}$$

$$\Rightarrow \quad x_2 = (b_2^{(3)} - a_{23}^{(2)} x_3) / a_{22}^{(2)}$$

$$\Rightarrow \quad x_1 = (b_1^{(3)} - a_{12} x_2 - a_{13} x_3) / a_{11}$$

Gaussの消去法まとめ：一般次元(1/2)

- 前進消去：次の行列を両辺にかけること

$$M_k = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & & & 0 \\ 0 & \ddots & & & & \\ \vdots & & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ 0 & & -m_{n,k} & 0 & \ddots & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{i,k} = \frac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad a_{k,k}^{(k)} \neq 0$$

$$A^{(k+1)} = M_k M_{k-1} \cdots M_1 A, \quad b^{(k+1)} = M_k M_{k-1} \cdots M_1 b,$$
$$k = 1, 2, \cdots, n-1$$

Gaussの消去法まとめ:一般次元(2/2)

- 後退代入: 最後の行から逆に解いていく

$$x_n = b_n^{(n)} / a_{n,n}^{(n)}$$

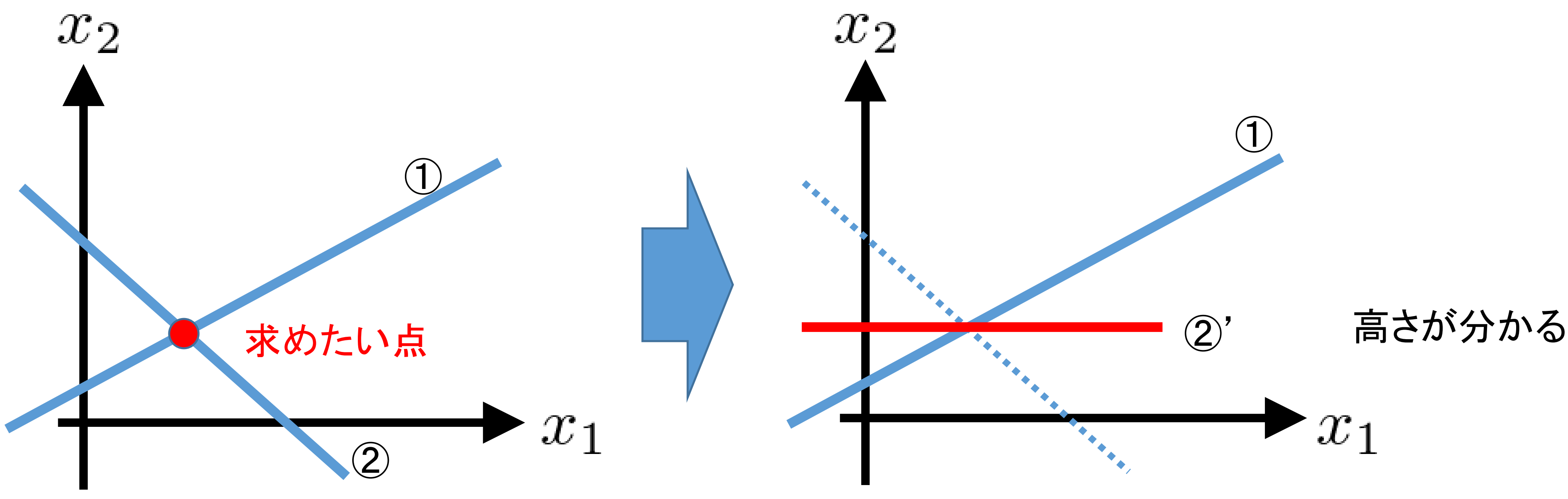
$$x_k = \left(b_k^{(n)} - \sum_{i=k+1}^{n} a_{k,i} x_i \right) / a_{k,k}^{(k)}$$

$$k = n-1, n-2, \cdots, 1$$

Gaussの消去法の幾何学的解釈

前進消去:　直線(超平面)を，座標の1つと並行化する

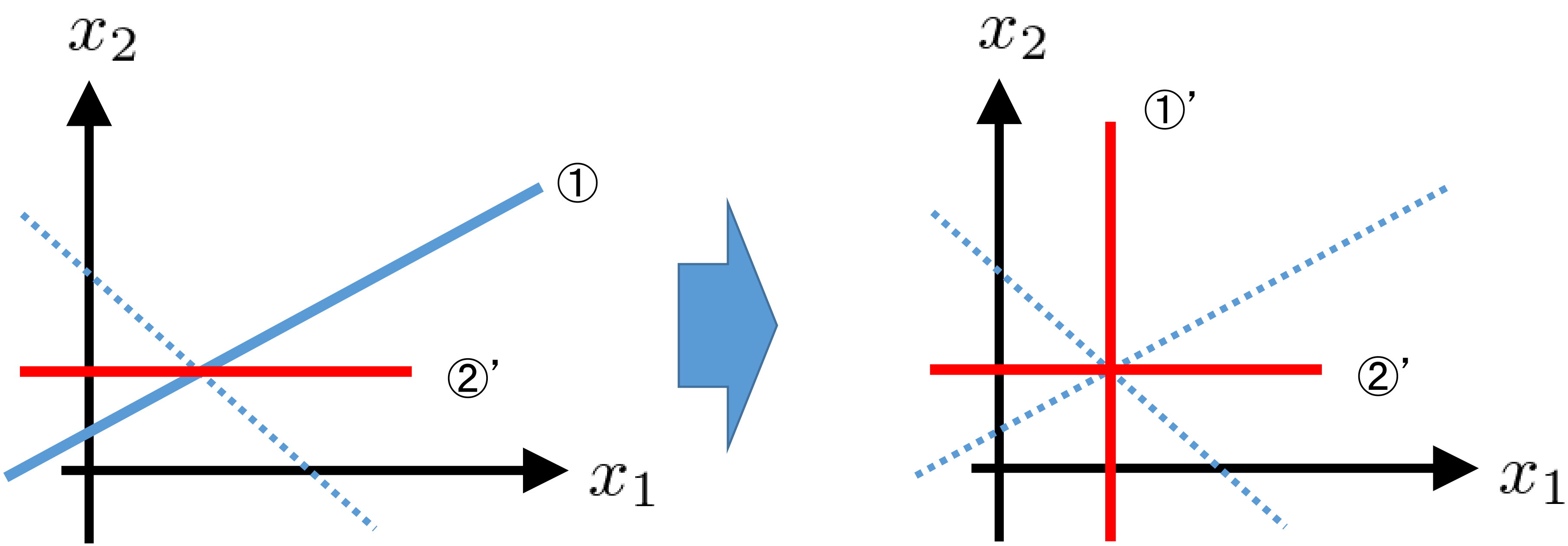
$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 & ① \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 & ② \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 & ① \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}x_2 = b_2^{(2)} & ②' \end{cases}$$



Gaussの消去法の幾何学的解釈

後退代入：　直線の直交化

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 & \text{①} \\ a_{22}^{(2)}x_2 = b_2^{(2)} & \text{②'} \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} a_{11}x_1 = b_1 - \dfrac{a_{12}b_2^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} & \text{①'} \\ a_{22}^{(2)}x_2 = b_2^{(2)} & \text{②'} \end{cases}$$



Gaussの消去法:ピボット選択

今までは，丸め誤差などの数値誤差を考慮していない

- 解の精度の向上，解の存在（ $a_{k,k}^{(k)} \neq 0$ を保証）
- 前進消去の k ステップ目において，k 列目の k 行以降の要素で，もっとも大きな値をもつ行を探す．

$$i_* = \mathrm{argmax}_i \{ |a_{i,k}^{(k)}| \ : \ i = k, \cdots, n \}$$

- 最も大きな要素の行を k 行目と入れ替える．

ピボット選択の意味

- 例題：10 進 4 桁の浮動小数点数

真の解

$$x = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} -0.001x_1 + 6x_2 =& 6.001 \\ 3x_1 + 5x_2 =& 2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} -0.001x_1 + 6x_2 =& 6.001 \\ 1.801 \times 10^4 x_2 =& 1.8 \times 10^4 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow x = \begin{bmatrix} {\color{red}-5} \\ 9.994 \times 10^{-1} \end{bmatrix}$$

ピボット選択の意味：例題

- 例題：10 進 4 桁の浮動小数点数

ピボット選択後

$$
\begin{aligned}
3x_1 + 5x_2 &= 2 \\
-0.001x_1 + 6x_2 &= 6.001
\end{aligned}
$$

真の解

$$
x = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{aligned}
3x_1 + 5x_2 &= 2 \\
6.002x_2 &= 6.002
\end{aligned}
$$

$$
x = \begin{bmatrix} -1.000 \\ 1.000 \end{bmatrix}
$$

正確な解を得る

意味のないピボット選択

- 例題：10進4桁の浮動小数点数

1行目を10000倍する

$$-10x_1 + 60000x_2 = 60010$$
$$3x_1 + 5x_2 = 2$$

真の解

$$x = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

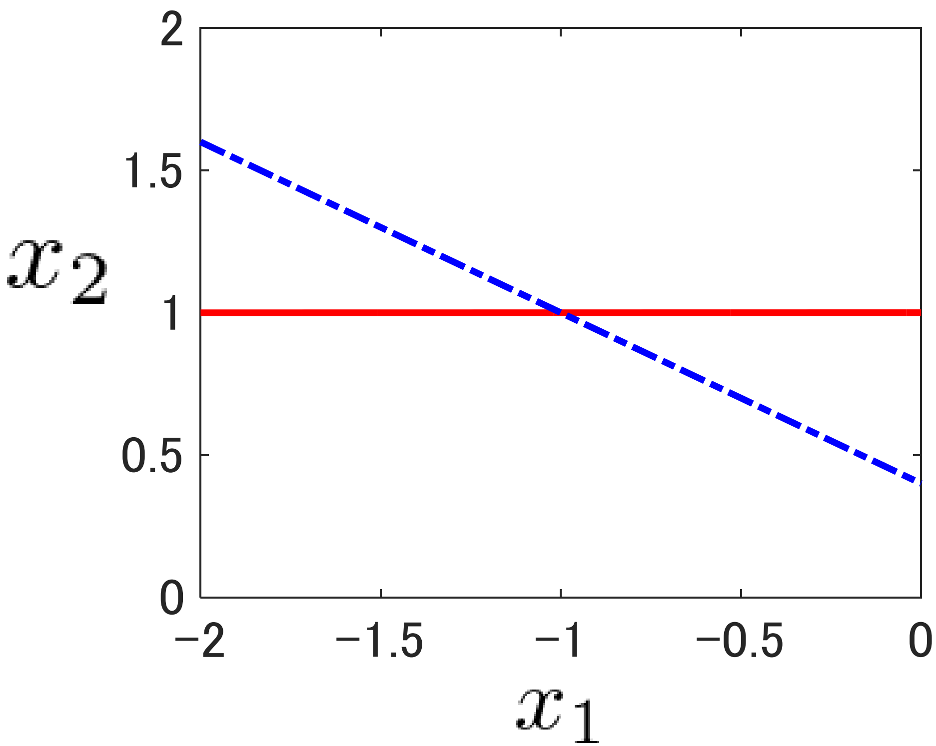
$$\Rightarrow \quad x = \begin{bmatrix} -5 \\ 9.994 \times 10^{-1} \end{bmatrix}$$

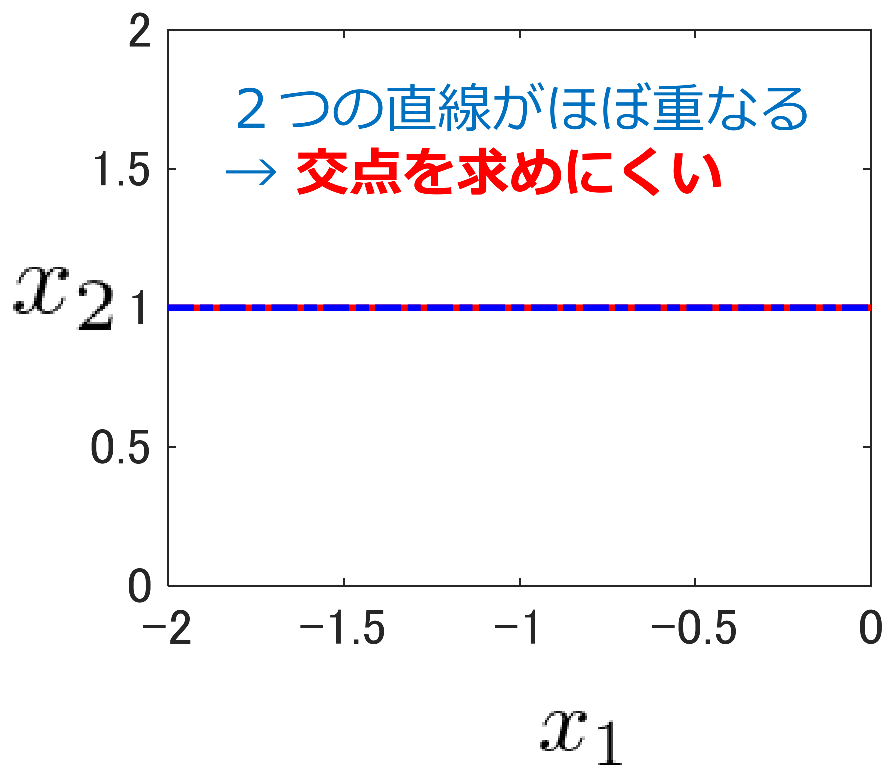
全く改善されない

ピボット選択の幾何学的解釈(1/2)

ピボット選択なしだと. . .

$$\begin{cases} -0.001x_1 + 6x_2 = 6.001 \\ 3x_1 + 5x_2 = 2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} -0.001x_1 + 6x_2 = 6.001 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

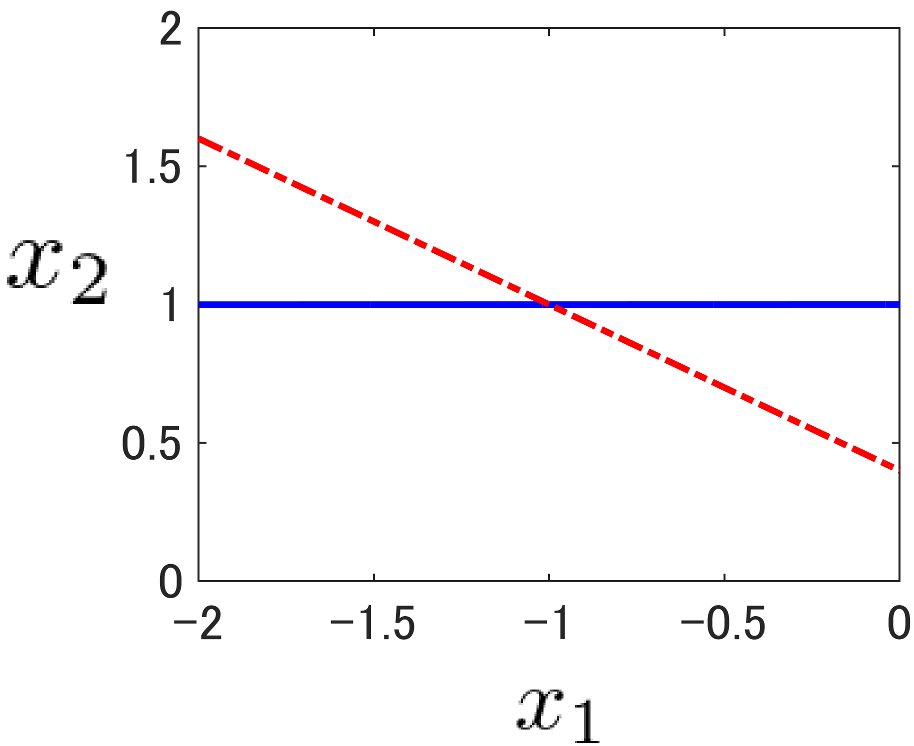


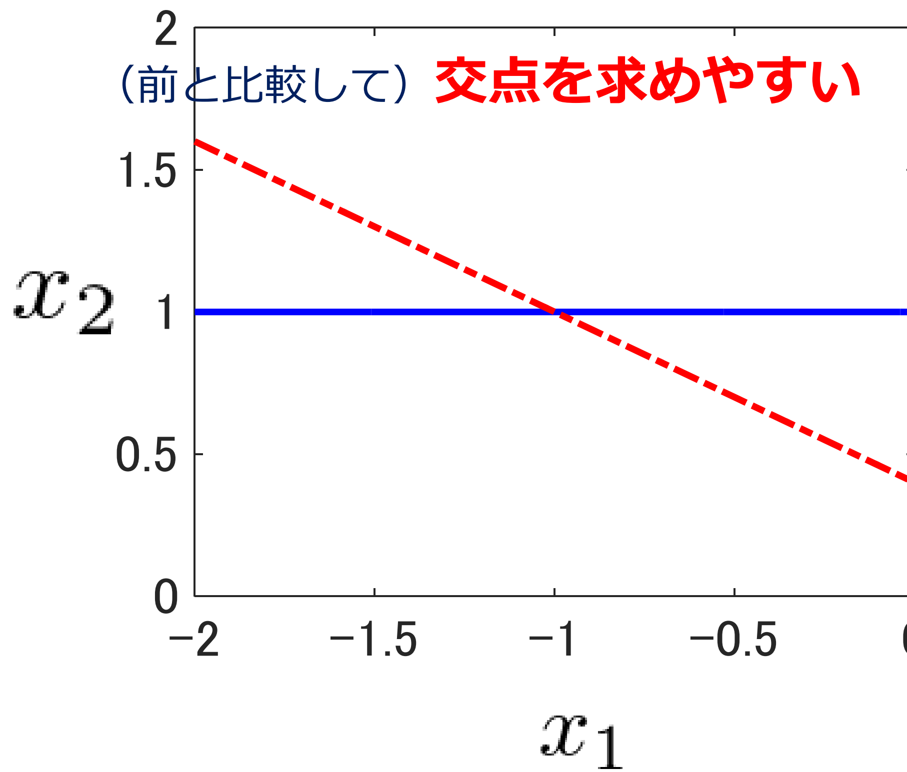


ピボット選択の幾何学的解釈(2/2)

ピボット選択すると. . .

$$
\begin{cases}
3x_1 + 5x_2 = 2 \\
-0.001x_1 + 6x_2 = 6.001
\end{cases}
\quad \Rightarrow \quad
\begin{cases}
3x_1 + 5x_2 = 2 \\
x_2 = 1
\end{cases}
$$





Gaussの消去法の丸め誤差評価

- 杉原，室田: 線形計算の数理，岩波書店 (2009)，定理2.9と定理2.10

定理

ピボット選択付きのGaussの消去法で計算された解x_R に対して

（ｉ） $$|(b - Ax_R)_i| \leq c_n \epsilon_M \sigma(A, x_R, b) \left(|b_i| + \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}||x_{R,j}| \right)$$

（ii） $$|(x - x_R)_i| \leq c_n \epsilon_M \sigma(A, x_R, b) \sum_{k=1}^{n} |(A^{-1})_{ik}| \left(|b_k| + \sum_{j=1}^{n} |a_{kj}||x_{R,j}| \right)$$

$$\sigma(A, x, b) := \frac{\max_i \left(|b_i| + \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}||x_{R,j}| \right)}{\min_i \left(|b_i| + \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}||x_{R,j}| \right)}$$

ϵ_M : マシンイプシロン（1より大きい最小の数と1との差）

c_n : nで決まる定数

Gaussの消去法の計算量

計算量のオーダーは $O(n^3)$

※ プログラムの一部

前進消去

```
for k=1:n
    for i=k+1:n
        m(i,k) = A(i,k)/A(k,k);
        for j = k+1:n
            A(i,j) = A(i,j) - m(i,k)*A(k,j);
        end
        b (i)= b(i) - m(i,k)*b(k);
    end
end
```

$$\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=k+1}^{n}\left(2+\sum_{j=k+1}^{n}\right)=\frac{1}{3}n^3+O(n^2)$$

後退代入

```
x(n) = b(n) / A(n,n);
for i=n-1:-1:1
    x(i)=b (i);
    for k=1:i
        x(k) = x(k) - A (k,i+1)*x(i+1);
    end
    x(i) = x(i) / A (i,i);
end
```

$$1+\sum_{i=1}^{n-1}\left(2+\sum_{k=1}^{i}\right)=\frac{1}{2}n^2+O(n^2)$$

LU分解

- 複数のデータから，解を求めたい場合も多い
- 例えば画像処理など

$$Ax_i = b_i,\ \ A \in \mathbb{R}^{n\times n},\ \ x_i, b_i \in \mathbb{R}^n, i = 1, \cdots, m$$

$$Ax = \underbrace{M_1^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1}}_{=:L} \underbrace{M_{n-1} \cdots M_1 A}_{=:A^{(n)} =: U} x = b$$

この行列 *L* , *U* を計算して求めておく

LU分解

$$U = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & & 0 & a_{n,n}^{(n)} \end{bmatrix}$$

右上三角行列

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & & & 0 \\ m_{21} & 1 & & & & \vdots \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

左下三角行列

LU分解

行列 *L*, *U* を求める計算量は，Gaussの消去法と同じ

$$\left.\begin{array}{ll} Ly = b & \text{前進代入} \\ Ux = y & \text{後退代入} \end{array}\right\}$$

計算量

$O(n^2)$

異なる *b* に対して連立一次方程式を
何度も解く必要がある場合に有効

LU分解に関するコメント

- A の逆行列を求めておき，b に掛け算する計算量と，LU分解より求める計算量は同じ n^2 になる．

$$x = A^{-1}b \quad \xleftrightarrow{\text{同じ計算量}} \quad \begin{cases} Ly = b, \\ Ux = y \end{cases}$$

- A が疎行列の場合，L と U も疎構造になり，次元が大きいと計算量が激減する（A の逆行列は一般的に疎行列にならない）

三重対角行列の場合

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad A^{-1} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 3 \end{bmatrix} \qquad {\color{blue}O(n^2)}$$

$$\Rightarrow \quad L = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 3 & 6 & 0 \\ 0 & 4 & 6 \end{bmatrix}, \quad U = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 12 & 6 & 0 \\ 0 & 9 & 6 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} \qquad {\color{red}O(n)}$$

Gaussの消去法の改良

- 行列 A が特殊な場合，計算量を減らせる
  - 対称行列： 修正Cholesky法 （半分に減らせる）
  - 正定値対称行列： Cholesky法 （半分に減らせる）

対称行列のLU分解

- 対称行列のLDL$^\top$分解

$$Ax = \underbrace{M_1^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1}}_{=:{\color{red}L}} \underbrace{M_{n-1} \cdots M_1 A}_{=:A^{(n)}=:{\color{red}U}} x = b$$

$$U = DL^\top, \quad D = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & & & \\ & a_{22}^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$ ${\color{red}A = LDL^\top}$

修正Cholesky法

- 対称行列 A のLDL^{T}分解

```
d=zeros(b); d(1)=A(1,1); L=zeros(A);
for j=1:n
    L(j,j)=1;
end
d(1)=A(1,1);
for k=2:n
  for i=1:k-1
    if i>=2 then z=0;
      for j=1:i-1
        z=z+L(k,j) * L(i,j) * d(j);
      end
    else
      z=0;
    end
    L(k,i) = (A(k,i) - z)/d(i);
    d(k) = d(k) - L(k,i) ^2 * d(i);
  end
  d(k) = d(k) + A(k,k) ;
end
```

次の手順で連立一次方程式を解く

$$\left\{\begin{aligned} Ly &= b \\ DL^\top x &= y \end{aligned}\right.$$

※ Lの成分は左下三角行列部分だけ求めればよい．
（計算量の半減）

Cholesky法

- 正定値対称行列の場合，$\mathrm{LDL}^{\mathrm{T}}$分解より，

$$A = S^\top S, \quad S := D^{1/2} L^\top$$ （右上三角行列）

$$\begin{cases} s_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki}^2}, \quad s_{11} = \sqrt{a_{11}} \\ s_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki} s_{kj} \right) / s_{ii}, \ \ s_{ij} = a_{ij} / s_{11} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} S^\top y = b \\ Sx = y \end{cases}$$

※ 平方根の計算方法は，2章で扱う

本日の内容

- ❖ 連立一次方程式の例：3次元情報の復元
- ❖ 連立一次方程式の数値解法（1）
  - ❖ Gaussの消去法
  - ❖ 誤差評価
- ❖ 連立一次方程式の数値解法（2）
  - ❖ 反復法

反復法

- 主に大規模疎行列を扱う場合に用いられることが多い数値解法
- 適当な初期値を与えて，漸近的に解を得る

疎行列（要素の大部分がゼロの行列）の例

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \ddots & & & \\ 0 & \cdots & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

反復法の基本概念

- $Ax = b$ に対し,
  適当な初期値　$x^{(1)} = x_*$ を与え,

$$x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + Nb,$$

$$\lim_{k\to\infty} \|x^{(k)} - x\| = 0$$

  を達成する. ここで行列 *M*, *N* は行列 *A* とアルゴリズムによって定まる行列

代表的な反復法

- Jacobi法
- Gauss – Seidel 法
- SOR法（加速緩和法）

※ 行列の正則性は仮定

Methods	M	N
Jacobi	$-D^{-1}(E+F)$	D^{-1}
Gauss-Seidel	$-(E+F)^{-1}F$	$(D+E)^{-1}$
SOR	M_ω	$\omega(D+\omega E)^{-1}$

$$M_\omega := (I+\omega D^{-1}E)^{-1}\{(1-\omega)I-\omega D^{-1}F\}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{bmatrix}}_{=:D} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 \end{bmatrix}}_{=:E} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} \\ 0 & 0 & a_{23} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{=:F}$$

Jacobi法

D は正則であると仮定する

$$Ax = (D + E + F)x = b$$

$$\Rightarrow \quad Dx = -(E + F)x + b$$

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

これを更新式とみなす

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

Jacobi法：要素毎の計算

$$x_j^{(k+1)} = a_{jj}^{-1}\left(b_j - \sum_{i=1, i\neq j}^{n} a_{ji} x_i^{(k)}\right)$$

各ステップで *j*=1 から計算していく

➡ 各ステップで，*j*≧2 ならば，それ以前の値を用いることができる

$$x_j^{(k+1)} = a_{jj}^{-1}\left(b_j - \sum_{i=1}^{j-1} a_{ji} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=j+1}^{n} a_{ji} x_i^{(k)}\right)$$

Gauss-Seidel法

$$x_j^{(k+1)} = a_{jj}^{-1} \left(b_j - \sum_{i=1}^{j-1} a_{ji} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=j+1}^{n} a_{ji} x_i^{(k)} \right)$$

ベクトル形式で書き直すと,

$$x^{(k+1)} = D^{-1} \left(b - E x^{(k+1)} - F x^{(k)} \right)$$

$$\Rightarrow \quad x^{(k+1)} = -(D+E)^{-1} F x^{(k)} + (D+E)^{-1} b$$

反復法の更新則

- 更新式の解釈

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \underbrace{\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right)}_{\text{修正項}}$$

- 1次元の更新式を考える

$$x^{(k+1)} = \lambda x^{(k)} + c, \ \ |\lambda| < 1 \quad \Rightarrow \quad \lim_{k\to\infty} x^{(k+1)} = \frac{c}{1-\lambda}$$

$$\frac{\frac{c}{1-\lambda} - x^{(k)}}{x^{(k+1)} - x^{(k)}} = \frac{1}{1-\lambda} =: \omega > 0$$

形式的な更新則の改良（一般に等式は成り立たないことに注意）

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right)$$

SOR法（Successive Over-Relaxation）

Gauss-Seidel法の等式を利用

$$x^{(k+1)} = D^{-1}\left(b - Ex^{(k+1)} - Fx^{(k)}\right)$$

$$\begin{cases} \xi^{(k+1)} = D^{-1}\left(b - Ex^{(k+1)} - Fx^{(k)}\right) \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega\left(\xi^{(k+1)} - x^{(k)}\right) \end{cases}$$

$$x^{(k+1)} = (I + \omega D^{-1}E)^{-1}\{(1-\omega)I - \omega D^{-1}F\}x^{(k)} + \omega(D + \omega E)^{-1}b$$

反復法で漸近的に解が求められるには

- 十分条件: $\|M\| < 1$

- 必要十分条件: M の全ての固有値の絶対値が1未満

✓ 十分条件は, "縮小写像の原理"と呼ばれる定理から導かれる

✓ 縮小写像の原理は, 連立一次方程式のみでなく, 他の数値計算問題の反復解法でもよく用いられる

次回の講義予定

- 反復法の収束
- 反復法の続き（疎行列に対する数値解法）

数値計算ソフトウェア：Scilab

- 個人の責任で行ってください
  - 特に大学や他人の計算機に無断でインストールしないこと
- Scilab のホームページ（ https://www.scilab.org/ ）の上部タブから download をクリック
- 使っている計算機の OS と bit 数に対応する exe ファイルをダウンロードして実行
- 指示に従ってインストール

Scilab基本コマンド

- オンラインヘルプ（ http://help.scilab.org/ ）などを利用すること
  - （例）マシンイプシロン：コマンドラインに「%eps」と打つ
  - （例）四捨五入：「round(x)」と打つことで，10進数の小数点以下の四捨五入可能（xは数値）