プログラム演習
(6) 点ヤコビ法とガウス・ザイデル法を用いた連立一次方程式の反復解法

プログラム演習 (3) では連立一次方程式を Gauss の消去法によって解いた。例として、以下の連立方程式を解くことを考えよう。ここで、x_i は未知数、$a_{i,j}$、b_i は定数とする。

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 & + & a_{1,2}x_2 & + & a_{1,3}x_3 & = & b_1, \\ a_{2,1}x_1 & + & a_{2,2}x_2 & + & a_{2,3}x_3 & = & b_2, \\ a_{3,1}x_1 & + & a_{3,2}x_2 & + & a_{3,3}x_3 & = & b_3 \end{cases} \tag{1}$$

演習 (3) で説明したように、この連立一次方程式は行列とベクトルを用いて以下のように記述できる。

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{2}$$

この方程式の解は $\mathbf{A}$ の逆行列を用いて $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ と書ける。

Gauss の消去法では、前進消去と後退代入を行うことにより、この式を以下のように変形した。

$$\mathbf{I}\mathbf{x} = \mathbf{b}' \tag{3}$$

ここで、$\mathbf{I}$ は単位行列であることから、$\mathbf{x} = \mathbf{b}' = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ が得られることになる。

このような解法を**直接解法**と呼ぶが、直接解法は扱う問題の規模が大きくなると、必要とされる計算量が膨大なものとなる[1]ため、用いられる局面はかなり限定される。

直接解法を適用できない場合には、一般的には**反復解法**が用いられる。反復解法はさらに、定常反復法と非定常反復法とに分類することが出来、最近は主に後者が用いられることが一般的となりつつあるが、数値計算の基礎を学ぶという観点からは定常反復法に分類される古典的な手法を学ぶことが適切であると考える。そこで、本演習では、定常反復法に分類される超古典的な方法である**点ヤコビ法**と**ガウス・ザイデル法**を扱うこととする。

式 (1) で記述される連立方程式のうち i 番目のものを以下のように記述する。

$$a_{i,i}x_i + \sum_{j \neq i} a_{i,j}x_j = b_i \tag{4}$$

点ヤコビ法の計算手順は以下の通りである。

1. x_i の初期値 $x_i^{(0)}$ を設定する。何も考えない場合は $x_i^{(0)} = 0$ でよいであろう。
2. l 回目の反復では、既知である $x_i^{(l-1)}$ から $x_i^{(l)}$ を計算する。点ヤコビ法では式 (4) に基づく以下の式から $x_i^{(l)}$ を計算する。
$$x_i^{(l)} = \frac{b_i - \sum_{j \neq i} a_{i,j}x_j^{(l-1)}}{a_{i,i}} \tag{5}$$
3. 反復を繰り返し、$x_i^{(l)}$ がある値に漸近していく（**収束**と呼ぶ）場合に、それが解となる。

問題１：$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を点ヤコビ法で解き $\mathbf{x}$ を求めよ。ここで、

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 10 & 2 & 0 \\ 4 & 10 & 6 \\ 0 & 8 & 10 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} \tag{6}$$

とする。なお、得られた解は Gauss の消去法により得た参照解と比較し、妥当性を確認せよ。

なお、プログラム演習 (3) の問題については、反復解法によって解を得ることが出来ない（確かめてみるとよい）。

[1] Gauss の消去法の場合、計算量は概ね扱う行列のサイズの 3 乗に比例する）。

点ヤコビ法のステップ 2 では、おそらく i が小さいものから順に計算を行っていったであろう。すなわち、以下のような手順である。

$$x_1^{(l)} = \frac{b_1 - \sum_{j \neq 1} a_{1,j} x_j^{(l-1)}}{a_{1,1}}, \tag{7}$$

$$x_2^{(l)} = \frac{b_2 - \sum_{j \neq 2} a_{2,j} x_j^{(l-1)}}{a_{2,2}}, \tag{8}$$

$$\vdots$$

ここで、$x_2^{(l)}$ を計算する際には、$x_1^{(l)}$ はすでに得られていることが分かるであろう。従って、古い情報である $x_1^{(l-1)}$ を用いずに、より新しい情報である $x_1^{(l)}$ を用いたほうが、より早く収束解が得られるのではないかと考えられる。そこで、式 (5) の代わりに以下の式を用いることとする。

$$x_i^{(l)} = \frac{b_i - \sum_{j<i} a_{i,j} x_j^{(l)} - \sum_{j>i} a_{i,j} x_j^{(l-1)}}{a_{i,i}} \tag{9}$$

これが**ガウス・ザイデル法**である。

点ヤコビ法の概念を **Fig. 1** に、ガウスザイデル法の概念を **Fig. 2** に、それぞれ示す。図中の縦方向が反復回数に、横方向が x_j に、それぞれ対応する。

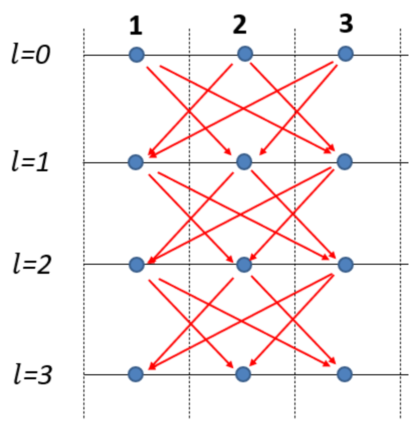

Fig. 1: 点ヤコビ法の概念

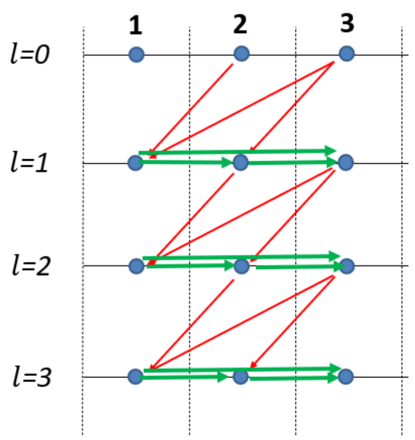

Fig. 2: ガウスザイデル法の概念

問題 2：問題 1 をガウス・ザイデル法を用いて解くとともに、同一の反復回数（例えば 50 回）で得られた結果の精度を点ヤコビ法と比較せよ。