数理解析研究所講究録
1040巻 1998年 172-179

一般化優対角行列の新しい判定法

岡山理科大学大学院理学研究科 笹辺盛登 (*Morito Sasanabe*)
岡山理科大学総合情報学部 澤見英男 (*Hideo Sawami*)
岡山理科大学総合情報学部 仁木 滉 (*Hiroshi Niki*)

1 概要

行列 A について次の条件

$$|a_{ii}|x_i \geq \sum_{j\neq i} |a_{ij}|x_j \ , 1 \leq i \leq n$$

を満たす正のベクトル$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^t$が存在するとき，$A$ を一般化優対角行列と呼ぶ．そして，A が一般化優対角行列のとき，AD が狭義優対角行列となるような正の対角行列 $D = diag(d_1, d_2, \ldots, d_n)$ が存在する．A が一般化優対角行列のとき基本反復法が収束することはよく知られている．

したがって，与えられた行列が一般化優対角行列であるか否かの簡単な判定法が必要である．そのための種々の判定法 [1],[2],[3] が報告されているが，それぞれ計算量，安定性などに関して一長一短がある．そこで我々は以下に述べる優対角度を用いた反復型判定法を提案した [4].

2 優対角度を用いた反復型判定法

$N = \{1, 2, \ldots, n\}$ とする．狭義優対角が成立している行を集合

$$N_1 = \{i | |a_{ii}| > \sum_{j\neq i} |a_{ij}|, i \in N\} \neq \phi$$

で表し，成立しない行の集合を N_2とする．そのとき次の手順で計算する．

(1) 対角行列 D を次のように決める．

$$D^{(1)} = diag(d_1, d_2, \ldots, d_n)$$

$$d_i = \begin{cases} t_i & , \quad i \in N_1 \\ 1 & , \quad i \in N_2 \end{cases}$$

ここで，$t_i = \frac{\sum_{j\neq i} |a_{ij}|}{|a_{ii}|}$とおき，優対角度と定義する．

(2) $A^{(1)} = AD^{(1)}$を計算する．

(3) $A^{(1)}$が狭義優対角でない場合，1に戻って $A^{(k)}, k = 2, 3, \ldots$が狭義優対角になるまで繰り返す．

与えられた行列が一般化優対角行列の場合には，優対角度を用いた反復型判定法が一番効率的である．しかしながら，この反復型判定法では，非一般化優対角行列の判定を行うのに不充分である．そこで，[7] と [5] を非一般化優対角行列を簡単に判定できる実用的な方法を提案する．

3 LU 分解を用いた判定法 [7]

定理 3.1

$n \times n$ 複素行列 $A = [a_{ij}]$ に対して，A が一般化優対角行列のとき A は H 行列である．そのとき $A = LU$ と分解すると L と U の対角項はすべて正の値を持つことが証明されている [7,p135]．したがって，A を LU 分解して u_{ii}が 1 となるような以下のアルゴリズムを用いて判定する．

$$\begin{cases} l_{kk} &= |a_{kk}| - \sum_{p=1}^{k-1} l_{kp}u_{pk} \qquad (1 \le k \le n) \\ u_{kj} &= \dfrac{1}{l_{kk}}(-|a_{kj}| - \sum_{p=1}^{k-1} l_{kp}u_{pj}) \quad (1 \le k < j \le n) \\ l_{ik} &= -|a_{ik}| - \sum_{p=1}^{k-1} l_{ip}u_{pk} \qquad (1 \le k < i \ne n). \end{cases}$$

ここで，$l_{ii} > 0$ のとき A は一般化優対角である．

4 新しい一般化優対角行列の判定法

補題 4.1

与えられた係数行列 A に関して以下の関係

$$\begin{cases} |a_{ii}| &\le \sum_{\substack{j=1 \\ i \ne j}}^{n} |a_{ij}| \qquad (i \ne k) \\ |a_{kk}| &> \sum_{\substack{j=1 \\ j \ne k}}^{n} |a_{kj}| \end{cases}$$

が成立しているものとする．このとき，AD が狭義優対角行列のとき，対角行列 D は次の条件を満たす

$$\frac{\sum_{\substack{j=1 \\ j \ne k}}^{n} |a_{kj}|}{a_{kk}} < d_k < \frac{|a_{ii}| - \sum_{\substack{j=1 \\ j \ne k}}^{n} |a_{ij}|}{a_{ik}} \qquad (i \ne k).$$

証明

行列 A の k 行が優対角のとき

$$D = diag(1, \cdots, 1, d_k, 1, \cdots, 1)$$

とおくと，

$$\begin{aligned} AD &= \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ & \ddots & & & \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kn} \\ & & & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & d_k & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k}d_k & \cdots & a_{1n} \\ & \ddots & & & \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk}d_k & \cdots & a_{kn} \\ & & & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nk}d_k & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となり，AD が狭義優対角行列になるためには，次の不等式を満たさなければならない．

$$a_{kk}d_k > a_{k1} + \cdots + a_{kk-1} + a_{kk+1} + \cdots + a_{kn}$$

$$\begin{cases} a_{11} & > \; a_{12} + \cdots + a_{1k}d_k + \cdots + a_{1n} \\ \vdots & \quad \vdots \\ a_{k-1k-1} & > \; a_{k-11} + \cdots + a_{k-1k-2} + a_{k-1k}d_k + a_{k-1k+1} + \cdots + a_{k-1n} \\ a_{k+1k+1} & > \; a_{k+11} + \cdots + a_{k+1k-1} + a_{k+1k}d_k + a_{k+1k+2} + \cdots + a_{k-1n} \\ \vdots & \quad \vdots \\ a_{nn} & > \; a_{n1} + \cdots + a_{nk}d_k + \cdots + a_{nn-1} \end{cases}$$

整理すると，次の不等式を得る

$$\frac{\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} |a_{kj}|}{a_{kk}} < d_k < \frac{|a_{ii}| - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{n} |a_{ij}|}{a_{ik}} \quad (i \neq k).$$

定理 4.2

行列 A が補題 4.1 の条件を満たし，次式

$$\frac{1}{\prod_{i=1, i\neq k}^{n} t_i} < \frac{|a_{ii}| - \sum_{j=1, j\neq i,k}^{n} |a_{ij}|}{|a_{ik}|}$$

を満たしていると仮定する．このとき，

$$\prod_{i=1}^{n} t_i < 1 \text{ を満たすとき，すべての } i \text{ に対して，} \tilde{t}_i < 1 \tag{1}$$

が成立する．ここで，$\tilde{t}_i$は$\tilde{A} = AD$と置いたときの$\tilde{A}$の各行の優対角度である．

証明

仮定から，

$$\begin{aligned}\prod_{i=1}^{n} t_i &= \frac{|a_{12}| + \cdots + |a_{1n}|}{|a_{11}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{k1}| + \cdots + |a_{kk-1}| + |a_{kk+1}| + \cdots + |a_{kn}|}{|a_{kk}|} \\ &\quad \cdots \cdot \frac{|a_{n1}| + \cdots + |a_{nn-1}|}{|a_{nn}|} \\ &< 1\end{aligned}$$

であるから，

$$\frac{|a_{11}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{1j}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{kk}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{kj}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{nn}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{nj}|} > 1$$

となり，この式を整理すると

$$\frac{\sum_{\substack{j=1\\j\neq n}}^{n} |a_{kj}|}{|a_{kk}|} < \frac{|a_{11}|}{\sum_{j=2}^{n} |a_{1j}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{k-1k-1}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq k-1}}^{n} |a_{k-1j}|} \cdot \frac{|a_{k+1k+1}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq k+1}}^{n} |a_{k+1j}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{nn}|}{\sum_{j=1}^{n-1} |a_{nj}|}$$

が成立する．
また，補題4.1と仮定から，$i = k+1$に対して以下の式が得られる．

$$\frac{|a_{11}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{1j}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{k-1k-1}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{k-1j}|} \cdot \frac{|a_{k+1k+1}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{k+1j}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{nn}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{nj}|} < \frac{|a_{k+1k+1}| - \sum_{\substack{j=1\\j\neq k,k+1}}^{n} |a_{k+1j}|}{|a_{k+1k}|}$$

$$|a_{k+1k}| \cdot \frac{|a_{11}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{1j}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{k-1k-1}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{k-1j}|} \cdot \frac{|a_{k+1k+1}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{k+1j}|} \cdot \cdots \cdot \frac{|a_{nn}|}{\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{nj}|} < |a_{k+1k+1}| - \sum_{\substack{j=1\\j\neq k,k+1}}^{n} |a_{k+1j}|$$

$$|a_{k+1k}| \cdot \prod_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{n} |a_{ii}| < -\left\{ \sum_{\substack{j=1\\j\neq k,k+1}}^{n} |a_{k+1,j}| - |a_{k+1k+1}| \right\} \cdot \prod_{i\neq k}^{n} \sum_{j\neq i}^{n} |a_{ij}|$$

$$|a_{k+1k}|\cdot\prod_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{n}|a_{ii}|+\left\{\sum_{\substack{j=1\\ j\neq k,k+1}}^{n}|a_{k+1,j}|-|a_{k+1k+1}|\right\}\cdot\prod_{i\neq k}^{n}\sum_{j\neq i}^{n}|a_{ij}|<0.$$

この式を整理すると，

$$\frac{|a_{k+1k}|\prod\limits_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{n}|a_{ii}|+\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq k,k+1}}^{n}|a_{k+1j}|\prod\limits_{i=1,i\neq k}^{n}\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|}{|a_{k+1k+1}|\prod\limits_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{n}\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|}<1$$

$$\frac{|a_{k+1k}|\prod\limits_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{n}\dfrac{|a_{ii}|}{\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|}+\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq k+1}}^{n}|a_{k+1j}|}{|a_{k+1k+1}|}<1. \tag{2}$$

となる．ここで，$D=diag(d_1,\cdots,d_k,\cdots,d_n)$ を

$$\begin{cases} d_i = 1 & (i\neq k)\\ d_k > \dfrac{\sum\limits_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{n}|a_{kj}|}{|a_{kk}|} \end{cases}$$

とすると，d_kの定義から$\tilde{t_k}<1$となるので，(2) 式より，

$$\tilde{t}_{k+1}=\frac{|a_{k+1k}|\cdot\left(\frac{\sum_{j=1,j\neq k}^{n}|a_{kj}|}{|a_{kk}|}\right)+\sum_{j=1,j\neq k+1}^{n}|a_{k+1j}|}{|a_{k+1k+1}|}<1$$

が成立する．同様に，$d_k<1$ であるから，すべての i に対して$\tilde{t_i}<1$となり，式 (1)

$$\prod_{i=1}^{n}t_i<1 \text{ を満たすとき}, \tilde{t_i}<1$$

が成立する．

上式は 転置行列A^tに対しても成立する．すなわち，A^tに対する優対角度をτ_iとおくとき，

$$\prod_{i=1}^{n}\tau_i<1 \text{ を満たすとき}, \tilde{\tau}_i<1 \tag{3}$$

が同様の理論で成立する．したがって，判定として行あるいは列のいずれかで式 (1) あるいは式 (3) を満たせばよい．

次に，それぞれの判定法を用いて判定を行った結果を紹介する．

5 数値結果

以下の行列に対して各種の判定法を確かめることにする.

(a)

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 0.3 & 0.3 & 0.1 \\ 0.4 & 1 & 0.2 & 0.2 \\ 0.3 & 0.4 & 1 & 0.5 \\ 0.4 & 0.5 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}$$

(b)

$$A=\begin{pmatrix} 1.00000 & 0.00252 & 0.00789 & 0.37370 \\ 0.34460 & 1.00000 & 0.34460 & 0.73992 \\ 0.00789 & 0.00252 & 1.00000 & 0.37370 \\ 0.01609 & 0.00003 & 0.01609 & 1.00000 \end{pmatrix}$$

(c)

$$A=\begin{pmatrix} 1.0 & 0.2 & 0.1 & 0.2 & 0.1 \\ 0.4 & 1.0 & 0.2 & 0.1 & 0.1 \\ 0.9 & 0.2 & 1.0 & 0.1 & 0.1 \\ 0.3 & 0.7 & 0.3 & 1.0 & 0.1 \\ 1 & 0.3 & 0.2 & 0.4 & 1.0 \end{pmatrix}$$

(d)

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 0.8 & 0.1 \\ 0.5 & 1 & 0.3951 \\ 0.8 & 0.6 & 1 \end{pmatrix}$$

(e)

$$A=\begin{pmatrix} 1.0 & 0.3 & 0.1 & 0.2 & 0.1 \\ 0.2 & 1.0 & 0.2 & 0.3 & 0.1 \\ 0.4 & 0.2 & 1.0 & 0.2 & 0.1 \\ 0.3 & 0.4 & 0.5 & 1.0 & 0.6 \\ 0.4 & 0.3 & 0.2 & 0.4 & 1.0 \end{pmatrix}$$

(f)

$$A=\begin{pmatrix} 1.0 & 0.1 & 0.2 & 0.3 & 0.1 \\ 0.4 & 1.0 & 0.2 & 0.3 & 0.1 \\ 0.8 & 0.3 & 1.0 & 0.2 & 0.2 \\ 0.3 & 0.7 & 0.4 & 1.0 & 0.2 \\ 0.7 & 0.5 & 0.1 & 0.3 & 1.0 \end{pmatrix}$$

これら 6 つの例で行列 (a),(c) は [?], 行列 (f) は [5] において紹介されている例題である. これらの行列に対して, それぞれの方法を用いて判定を行った結果を表 1,2,3 にまとめた.

表 1. 優対角度を用いた反復型判定法

例	a	b	c	d	e	f
回数	6	2	13	19	72	23
結果	○	○	○	○	△	△

表 2.LU 分解を用いた判定法

例	a	b	c	d	e	f
結果	○	○	○	○	△	△

表 3. 新しい一般化優対角行列の判定法

例	a	b	c	d	e	f
$\prod t_{i(j)}$	0.9408	0.00679	0.93184	0.90108	1.17936	2.6800
結果	○	○	○	○	△	△

† (c),(d) に対しては列による判定を行った.

注). ○ :一般化優対角行列
△ :非一般化優対角行列

最後に，[6] の論文から得られる特殊な形の行列として取り上げることにする．

2 次元正方領域 $D=[0,1]\times[0,1]$ における Poisson 方程式の境界値問題を考える．

$$\begin{cases} -\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)=f(x,y) \\ u(x,y)=0 \quad on \quad \partial D \end{cases}$$

領域 D を図のように縦横それぞれ等間隔に m 等分して刻み幅を $h=1/m$ とし，座標 $y=l/m$ 上の格子線を境界 Γ として，下の領域 D_1 と上の領域 D_2 に分割する．

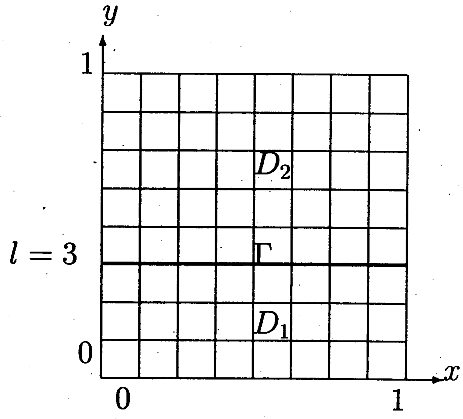

図 正方領域 $D=[0,1]\times[0,1]$ と境界 $\Gamma(m=8,l=3)$

ここで，境界 Γ における D_1 から D_2 に向かう法線方向微分 $\partial u/\partial y$ を $q(x)$ で表す．そして，$\partial^2u/\partial x^2$,$\partial^2u/\partial y^2$ を中心差分で，q を単純な差分で近似する．q を近似する式も含めて，離散化した方程式で表現すると次のような連立 1 次方程式が得られる．

$$\begin{pmatrix} K_{11}^{(1)} & K_{1B}^{(1)T} & 0 & 0 & 0 \\ K_{1B}^{(1)} & K_{BB}^{(1)} & \tilde{B}^{(1)T} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{B}^{(1)T} & D & \tilde{B}^{(2)T} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{B}^{(2)} & K_{BB}^{(2)} & K_{1B}^{(2)T} \\ 0 & 0 & 0 & K_{1B}^{(2)} & K_{11}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{(1)} \\ u_B^{(1)} \\ Q \\ u_B^{(2)} \\ u_1^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1^{(1)} \\ F_B^{(2)} \\ 0 \\ F_B^{(2)} \\ F_1^{(2)} \end{pmatrix}$$

ただし，

$$K_{11}^{(1)}=\begin{pmatrix} K_4 & -I & & \\ -I & K_4 & -I & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -I & K_4 \end{pmatrix}, K_{11}^{(2)}=\begin{pmatrix} K_4 & -I & & \\ -I & K_4 & -I & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -I & K_4 \end{pmatrix}$$

$$K_{1B}^{(1)}=(0\cdots 0|-I), K_{1B}^{(2)T}=(-I|0\cdots 0)$$

$$K_{BB}^{(1)}=K_3, K_{BB}^{(2)}=K_3, \tilde{B}^{(1)}=-I, \tilde{B}^{(2)}=I, D=-I,$$

$$K_4=\begin{pmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{pmatrix}, K_3=\begin{pmatrix} 3 & -1 & & & \\ -1 & 3 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 3 & -1 \\ & & & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

である．$u_I^{(1)}, u_B^{(1)}$等は格子点におけるuの値を並べたベクトル，Qは境界における$k \times q$の値を並べたベクトルで，右辺の$F_1^{(1)}$等は格子点における$h^2 \times f$の値を並べたベクトルである．

このような行列に対して各種の判定法では全て非一般化優対角行列であるとの判定結果が得られた．しかし，行列の基本変形を行うと優対角行列となった．

6 まとめ

以上の例から，反復型判定法は非一般化優対角行列の判定に多大の反復回数を要するために実用的でない．一方，LU 分解を用いた判定法では計算量において約$\frac{n^3}{3}$回の乗算が必要であるが，反復型判定法より安定な方法である．それに対して，本論文で提案した判定法では行，列の乗算をしても高々$2n$回の計算量ですむことから一番優れていることがわかる．線型方程式を解くために，優対角行列が必要なときは反復型判定法を用いればよい．

最後にあげた[6]の問題は，行列AがH行列ではないために従来の判定法が使えない．今後はこのクラスの問題に対する実用的な判定法の開発をする必要がある．

参考文献

[1] 原田益則，仁木滉，薄井正孝,「一般化優対角行列の判別法の拡張 (II)」，日本応用数理学会平成 7 年度年会講演予稿集,280-281(1995).

[2] Masunori Harada, Masataka Usui and Hiroshi Niki, An Extension of the Criteria for Generalized Diagonally Dominant Matrices, Intern.J.Comp.Math,60,115-119(1996).

[3] Li, B. ,Li, L., Niki, H., Harada, M., Tsatsomeros, M.J., An Iterative Criterion for H-Matrices, Linear Algebra and Its Applications,271,179-190(1998).

[4] 笹辺盛登,「一般化優対角行列の反復型判別法について」，GDDM ワークショップ，1997 年 3 月 15 日，岡山理科大学.

[5] 笹辺盛登，小武守恒，仁木滉「一般化優対角行列の新しい判別法」，日本応用数理学会平成 9 年度年会講演予稿集, (1997),178-179.

[6] 森正武，橋川善之「正負固有値が混在する行列に対する ICCG 法」，日本応用数理学会平成 9 年度年会講演予稿集,184-185(1997).

[7] Abraham Berman and Robrt J.Plemmons,NONNEGATIVE MATRICES IN THE MATHEMATICAL SCIENCES,ACADEMIC PRESS(1979).