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４回
・ 反復法

本日の内容

- ❖連立一次方程式の数値解法(2)
  - ❖反復法(Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR法)
  - ❖反復法の収束: 縮小写像の原理
  - ❖SOR法の加速パラメータについて

大規模疎行列

- 次元は大きいが，成分のほとんどがゼロの行列
  - 偏微分方程式の離散モデル
  - 近距離相互作用の物理モデル
  - インターネットや交通流などのネットワークモデル
- 解を得るために必要な計算回数は，少なくできる
  ⇒ 反復法は有効な手法の一つ

疎行列（要素の大部分がゼロの行列）の例

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

実質的な計算量は少ない

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，次の更新規則

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

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

  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,

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

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

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

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

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

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

本日の内容

- ❖連立一次方程式の数値解法(2)
  - ❖反復法(Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR法)
  - ❖反復法の収束: 縮小写像の原理
  - ❖SOR法の加速パラメータについて

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

反復法で収束した場合

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

ステップ数 k で収束しているならば,

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = 0 \;\Rightarrow\; (M - I)x = -Nb$$

（例）Jacobi 法の場合

$$(M - I) = -\{D^{-1}(E + F) + I\} = -D^{-1}\underbrace{(D + E + F)}_{=A}$$

$$x = -(M - I)^{-1}Nb = A^{-1}b$$

反復法の収束のための十分条件

$$\delta x^{(k)} := x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

差が小さくなっていけばよい

$$\delta x^{(k)} = M\delta x^{(k-1)}$$

$$\|\delta x^{(k)}\| = \|M\delta x^{(k-1)}\| \leq \underbrace{\|M\|}_{\text{誘導ノルム}}\|\delta x^{(k-1)}\|$$

$$\|M\| < 1 \quad \Rightarrow \quad \delta x^{(k)} \xrightarrow{k\to\infty} 0$$

縮小写像の原理

一般の非線形回帰方程式（非線形問題のアルゴリズム）

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)})$$

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n,\ \|\phi(x) - \phi(y)\| \leq q\|x - y\|$$

かつ，q は $0 < q < 1$

$$\Rightarrow \quad \delta x^{(k)} \xrightarrow{k\to\infty} 0$$

反復法の収束性

- 誘導ノルムの大きさは，ノルムに依存
- 都合のよいノルムが定義できればよい
- 線形回帰方程式の場合，都合のよいノルムが定義できる（代数Lyapunov 方程式を解けばよい（後述））

線形回帰方程式の収束性

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

任意の初期値から真値への収束するための必要十分条件

$$\rho(M) < 1 \;\Leftrightarrow\; x^{(k)} \xrightarrow{k\to\infty} x,\; \forall x^{(0)} \in \mathbb{R}$$

$$\rho(M) = \max_{i=1,2,\cdots,n} \{|\mu_i|\}$$

$\mu_i,\; i = 1, 2, \cdots, n$ ：M の固有値

誘導ノルムと固有値の関係

補題1.4

$$\forall \epsilon > 0,\ \exists \| \bullet \|_\alpha;\ \|M\|_\alpha \leq \rho(M) + \epsilon$$

※ 証明は教科書参照

$$\rho(M) < 1 \ \Rightarrow\ \forall \epsilon \in (0, 1-\rho(M)),\ \exists \| \bullet \|_\alpha;\ \|M\|_\alpha < 1$$

収束のための十分条件

収束のための必要十分条件

$$\delta x^{(k)} = M^k \delta x^{(0)}$$

初期誤差を固有ベクトルにとると，任意のノルムに対して，

$$\|\delta x^{(k)}\| = \|M^k \delta x^{(0)}\| = |\mu_i|^k \|\delta x^{(0)}\|$$

収束には，全ての固有値の絶対値が1未満であることが必要

定理 1.8

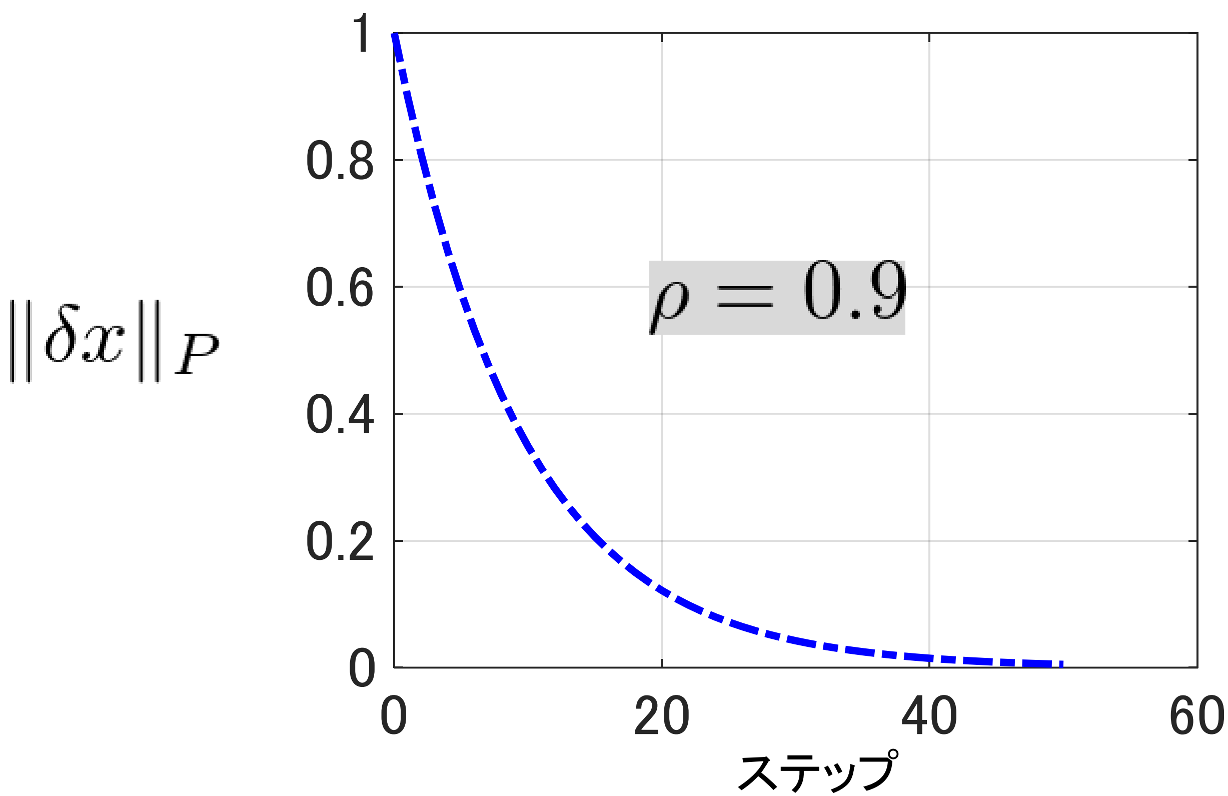
$$\rho(M) < 1 \iff \|\delta x^{(k)}\| \xrightarrow{k\to\infty} 0$$

※ノルムの同値性（定理1.1）より，ノルムは何でもよい

収束の速さ

反復法の収束は，指数的(一次収束)

$$\|\delta x^{(k)}\|_P = \rho^k \|\delta x^{(0)}\|_P \qquad \rho := \rho(M) < 1$$



具体的なノルムの構成について

$\|x\|_P = \sqrt{x^\top P x}, \quad P = P^\top > 0$ としたとき，

$$
\begin{aligned}
&\|\delta x^{(k+1)}\|_P^2 - \|\delta x^{(k)}\|_P^2 \\
&= (\delta x^{(k)})^\top \underbrace{\left(M^\top P M - P\right)}_{=: -Q} \delta x^{(k)} = -(\delta x^{(k)})^\top Q \delta x^{(k)}
\end{aligned}
$$

➡ $Q = Q^\top > 0$ ならば，真値へ収束する

逆に Q を与えて，適当なノルムを構成すればよい

固有値と代数Lyapunov方程式

命題（例えば，[井村，システム制御のための安定論，コロナ社]の定理3.14）

次の3つは同値

（ｉ） $\rho(M) < 1$

（ii） ある $Q = Q^\top > 0$ に対し，
（☆）を満たす $P = P^\top > 0$ が存在

（iii） 任意の $Q = Q^\top > 0$ に対し，
（☆）を満たす $P = P^\top > 0$ が存在

$$M^\top P M - P = -Q \quad \cdots (☆)$$

命題の補足

- 条件（ ii ）と条件（ iii ）について
  - （ iii ）のみだと，全ての正定値行列 Q に対して P を求め，正定値性をチェックする必要がある
  - （ ii ）はある1つの Q のみを調べればよいことを述べている
  - 2つを合わせると，適当な正定値行列 Q（例えば単位行列）に対して P を構成し，正定値性を調べればよい．
- 命題の条件を満たす P を用いると，

$$\|Mx\|_P^2 < \|x\|_P^2 - x^\top Qx, \ \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$$

$$\Rightarrow \quad \|M\|_P = \max_{x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Mx\|_P}{\|x\|_P} < 1$$

縮小写像の原理を利用可能

(Tips)代数Lyapunov方程式も連立一次方程式

代数Lyapunov方程式を変形(vec作用素を利用)

$$P = M^\top P M + Q$$

$$\Leftrightarrow (M^\top \otimes M^\top - I \otimes I)\mathrm{vec}(P) = -\mathrm{vec}(Q)$$

例

$$P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathrm{vec}(P) = \begin{bmatrix} P_{11} \\ P_{21} \\ P_{12} \\ P_{22} \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times 4}$$

異なる初期値に対する応答

$$
\begin{cases}
x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + Nb, & x^{(0)} = x_0 \in \mathbb{R}^n, \\
y^{(k+1)} = My^{(k)} + Nb, & y^{(0)} = y_0 \in \mathbb{R}^n,
\end{cases}
$$

$$z^{(k)} := x^{(k)} - y^{(k)}$$

差が縮まっていくならば，初期値を気にしなくてよい

$$\|z^{(k+1)}\|_P - \|z^{(k)}\|_P = (z^{(k)})^\top \underbrace{\left(M^\top PM - P\right)}_{=:-Q} z^{(k)}$$

$$Q = Q^\top > 0 \ \Rightarrow \ \lim_{k\to\infty} \|z^{(k)}\|_P = 0$$

縮小写像の原理が成り立つならば，初期値は好きにとってよい

反復法の丸め誤差の影響

$\rho(M) < 1$ として丸め誤差の影響を考える

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

$$\Rightarrow \quad x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + Nb + \xi^{(k+1)}$$

丸め誤差の影響を考慮

ステップ k における真値との誤差

真値 $\quad x_* = Mx_* + Nb$

$$\begin{aligned} e^{(k)} &:= x^{(k)} - x_* \\ &= Mx^{(k-1)} + Nb + \xi^{(k)} - x_* \\ &= Me^{(k-1)} + \underbrace{Mx_* + Nb}_{=x_*} - x_* + \xi^{(k)} = Me^{(k-1)} + \xi^{(k)} \end{aligned}$$

反復法の丸め誤差の影響

誤差:
$$e^{(k)} = M^k e^{(0)} + \sum_{j=1}^{k} M^{k-j} \xi^{(j)}$$

先ほど議論した，収束性の議論に都合のよいノルムを使って評価

仮定: $\|\xi^{(k)}\| \leq \epsilon, k = 0, 1, 2, \cdots$ を満たす正数が存在

$$\|e^{(k)}\| \leq \|M^k e^{(0)}\| + \sum_{j=1}^{k} \|M\|^{k-j} \|\xi^{(j)}\|$$

$$\leq \|M^k e^{(0)}\| + \epsilon \sum_{j=1}^{k} \|M\|^{k-j} = \|M^k e^{(0)}\| + \epsilon \frac{1 - \|M\|^k}{1 - \|M\|}$$

$$\Rightarrow \lim_{k \to \infty} \|e^{(k)}\| \leq \frac{\epsilon}{1 - \|M\|}$$

※ 冗長な評価

本日の内容

- 連立一次方程式の数値解法(2)
  - 反復法(Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR法)
  - 反復法の収束: 縮小写像の原理
  - SOR法の加速パラメータについて

SOR法と加速パラメータ

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

$$\begin{cases} M_\omega := (I + \omega D^{-1} E)^{-1}\{(1-\omega)I - \omega D^{-1} F\} \\ \omega : \text{加速パラメータ} \end{cases}$$

$\det(M_\omega) = (1-\omega)^n$ より，次が成り立つ

命題（[杉原，室田：線形計算の数理，岩波書店]の定理3.7）

$$\det(D) \neq 0 \;\Rightarrow\; \forall \omega > 0,\; \rho(M_\omega) \geq |\omega - 1|$$

⇒ $0 < \omega < 2$ は $\rho(M_\omega) < 1$ のための**必要条件**

反復法が収束する例

- SOR法が収束する例
  - A が正定値対称行列の場合, $0 < \omega < 2$ で収束する（[杉原，室田：線形計算の数理，岩波書店]の定理3.8）
  - A が優対角行列やM行列の場合では，ω の範囲が狭くなるが，収束するパラメータを選べる
- Jacobi法，Gauss-Seidel法などの例は，教科書や参考文献を参照のこと
  （e.g.，［杉原，室田：線形計算の数理，岩波書店］の第3章）

次回の講義予定

- 連立一次方程式(3)
  - 逐次最小化法
  - 共役勾配法
  - Krylov 部分空間法