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5回
- 逐次最小化法
- 共役勾配法

本日の内容

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

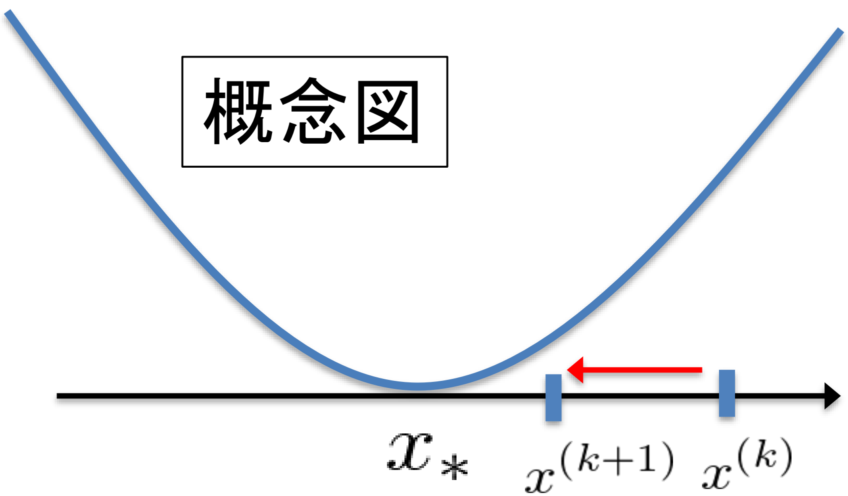
逐次最小化法

$$Ax_* = b, \ \ A = A^\top > 0$$

コスト関数： $$S(\xi) := \frac{1}{2}(x_* - \xi)^\top A(x_* - \xi)$$

$$S(x^{(k+1)}) \leq S(x^{(k)})$$

となるように，ベクトルを更新すればよい



逐次最小化法

- アルゴリズムの基本

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \quad \alpha_k \in \mathbb{R}, \quad p^{(k)} \in \mathbb{R}^n$$

修正の大きさ　修正の方向

1. 修正の方向 $p^{(k)}$ を定める
2. 修正の方向に向かって，コスト関数が極小になる点へと修正する

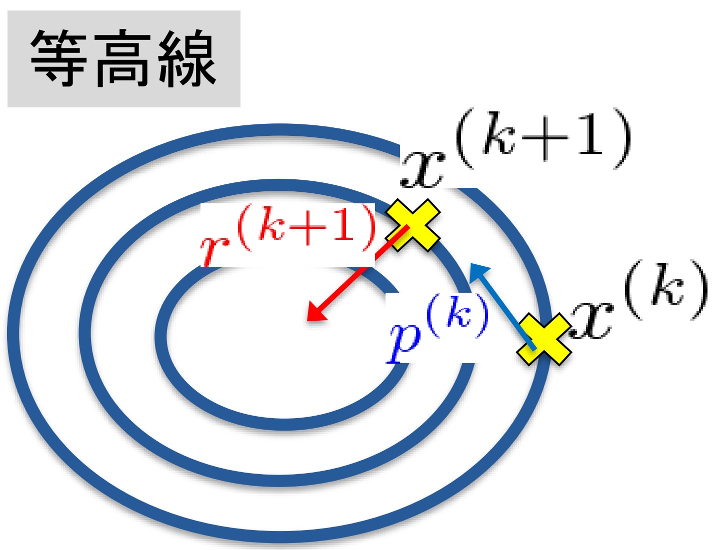
$$\frac{\partial S(x^{(k+1)})}{\partial \alpha_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_k = \frac{(p^{(k)})^\top (b - Ax^{(k)})}{(p^{(k)})^\top A p^{(k)}}$$

$$\Rightarrow \quad S(x^{(k+1)}) = S(x^{(k)}) - \frac{1}{2} \frac{\{(p^{(k)})^\top (b - Ax^{(k)})\}^2}{(p^{(k)})^\top A p^{(k)}}$$

修正の方向を有効に決めれば，真値に近づいていく

逐次最小化法の幾何学的解釈

残差ベクトル： $r^{(k)} = b - Ax^{(k)} \left(= A(x_* - x^{(k)})\right)$



$$\nabla S(\xi) := \begin{bmatrix} \frac{\partial S(\xi)}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial S(\xi)}{\partial \xi_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial S(\xi)}{\partial \xi_n} \end{bmatrix} = -(b - A\xi)$$

$$r^{(k)} = -\nabla S(x^{(k)})$$

⇒ $p^{(k)} = r^{(k)}$と選ぶと良さそう

最急降下法 (steepest descent method)

最急降下法のデメリット

- 残差ベクトルが小さくなると，数値誤差により修正の方向を正確に求められない
- 2ノルムに関する条件数を用いて，

$$S(x^{(k+1)}) \leq \left(\frac{\kappa_2(A) - 1}{\kappa_2(A) + 1} \right)^2 S(x^{(k)})$$

証明は，レポート課題

⇨ 条件数が悪いと，収束が遅くなりがち

⇨ 共役勾配法（conjugate gradient method）

本日の内容

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

共役なベクトルと残差ベクトル

$$Ax_* = b,\ \ A = A^\top > 0$$

- $p^{(i)} \in \mathbb{R}^n,\ \ i = 0, 1, \cdots, n-1$ は一次独立
- A に関して互いに直交： $(p^{(j)})^\top A p^{(k)} = 0,\ \ j \neq k$

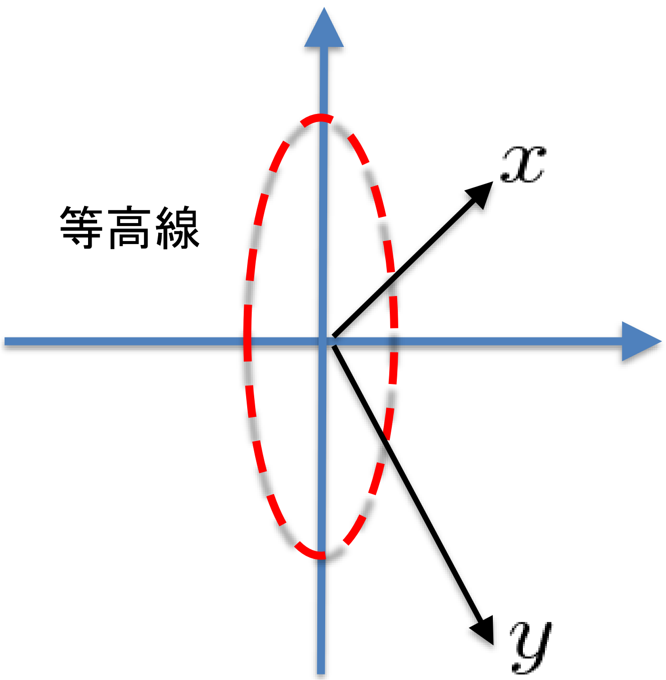
  ※ Aに関して互いに共役であるともいう

補題1.5

逐次最小化において，修正の方向 $p^{(i)} \in \mathbb{R}^n, i = 0, 1, \cdots, k$ が A に関して互いに直交

$$\Rightarrow\quad (p^{(i)})^\top r^{(k+1)} = 0,\ \ i = 0, 1, \cdots, k$$

共役なベクトルの例



$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$ 等高線が楕円になる

$$x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \longleftrightarrow y = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

互いに直交

共役勾配法

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)},\ \ \alpha \in \mathbb{R},\ \ p^{(k)} \in \mathbb{R}^n$$

■ 修正の方向

$$\beta_{k-1} = -\frac{(p^{(k-1)})^\top A r^{(k)}}{(p^{(k-1)})^\top A p^{(k-1)}}$$

$$\begin{aligned} p^{(k)} &= r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)},\ \ k = 1, 2, \cdots, \\ p^{(0)} &= b - Ax^{(0)} \end{aligned}$$

※ $(p^{(k-1)})^\top A p^{(k)} = 0$ となるように選んでいる

■ 修正の大きさ：逐次最小化法と同じ

$$\alpha_k = \frac{(p^{(k)})^\top (b - Ax^{(k)})}{(p^{(k)})^\top A p^{(k)}}$$

共役勾配法の性質

補題1.6

共役勾配法で生成した修正の方向と残差ベクトルに対し,

$$(r^{(i)})^\top r^{(j)} = 0,\ (p^{(i)})^\top A p^{(j)} = 0,\ i \neq j, i, j = 0, 1, \cdots k < n$$

探索を繰り返すと, *n* ステップ目で生成される残差ベクトルがゼロ

※　$\mathbb{R}^n$の直交ベクトルは, *n* 本しかとれないため

⇨ $r^{(n)} = 0$ ⇨ $x^{(n)} = x_*$ 真値に収束

実際の問題では, 丸め誤差の影響があるため, *n* 回以上繰り返す

⇨ $\epsilon > 0$ を設定し, $\|r^{(k+1)}\| \leq \epsilon \|b\|$ となったら反復を終える

共役勾配法の前処理

- 共役勾配法は，*A* が単位行列の定数倍のとき，逐次最小化法と同じ評価が可能

$$S(x^{(k+1)}) \leq \left(\frac{\kappa_2(A) - 1}{\kappa_2(A) + 1} \right)^2 S(x^{(k)})$$

$$\kappa_2(A) = 1$$ ⇒ 1ステップで到達可能

- *A*行列に前処理を行い，単位行列に近い行列にする

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

$$\underbrace{C^{-1} A C^{-\top}}_{\text{単位行列に近い行列にする}} C^{\top} x = C^{-1} b$$ ⇒ 早く解が求まる

共役勾配法のアルゴリズムまとめ

※ 正定値対称行列 A の場合

$$p^{(0)} = r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$$

解の更新

$$\boxed{x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}}$$

残差

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)} \left(= b - Ax^{(k+1)} \right)$$

修正の方向

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

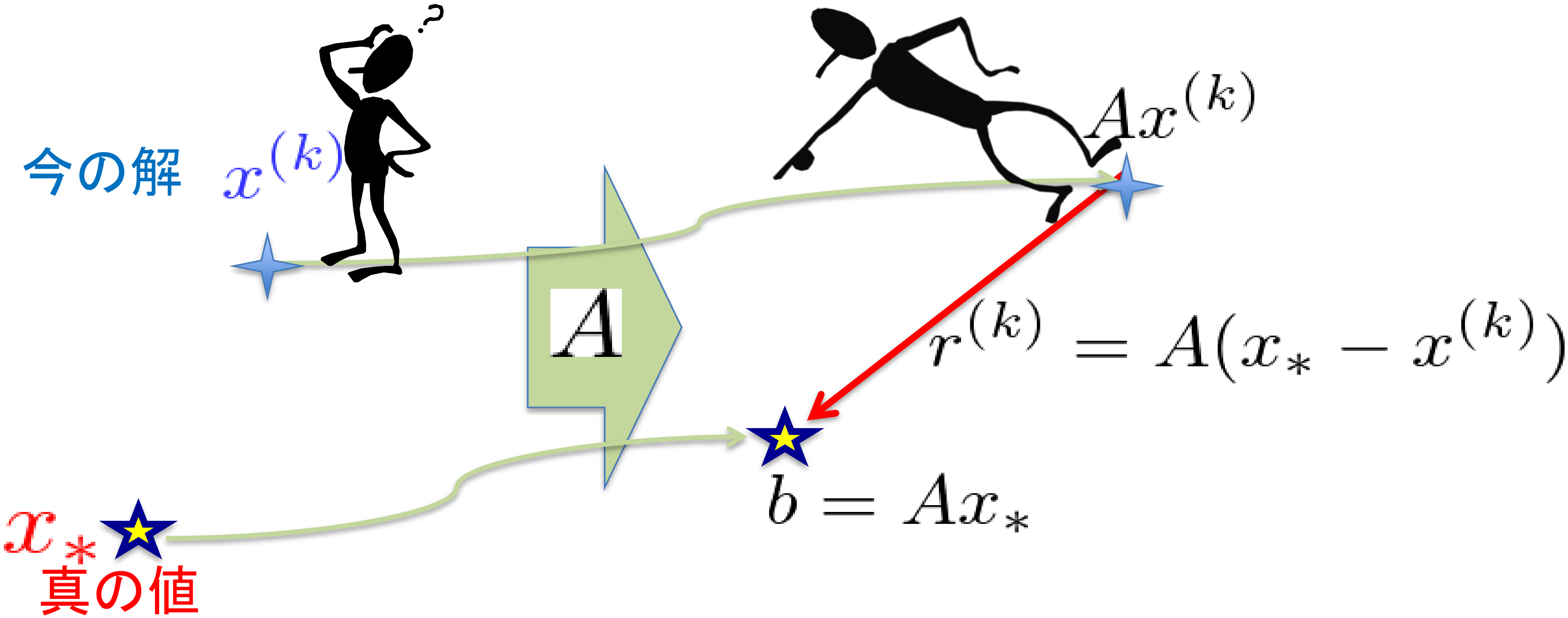
$$\alpha_k = \frac{\left(r^{(k)}, r^{(k)}\right)}{\left(p^{(k)}, Ap^{(k)}\right)}, \quad \beta_k = \frac{\left(r^{(k+1)}, r^{(k+1)}\right)}{\left(r^{(k)}, r^{(k)}\right)}$$

修正の大きさ　　　　修正の方向の更新

逐次最小化法の考え方

真の解がどこか分からない・・・

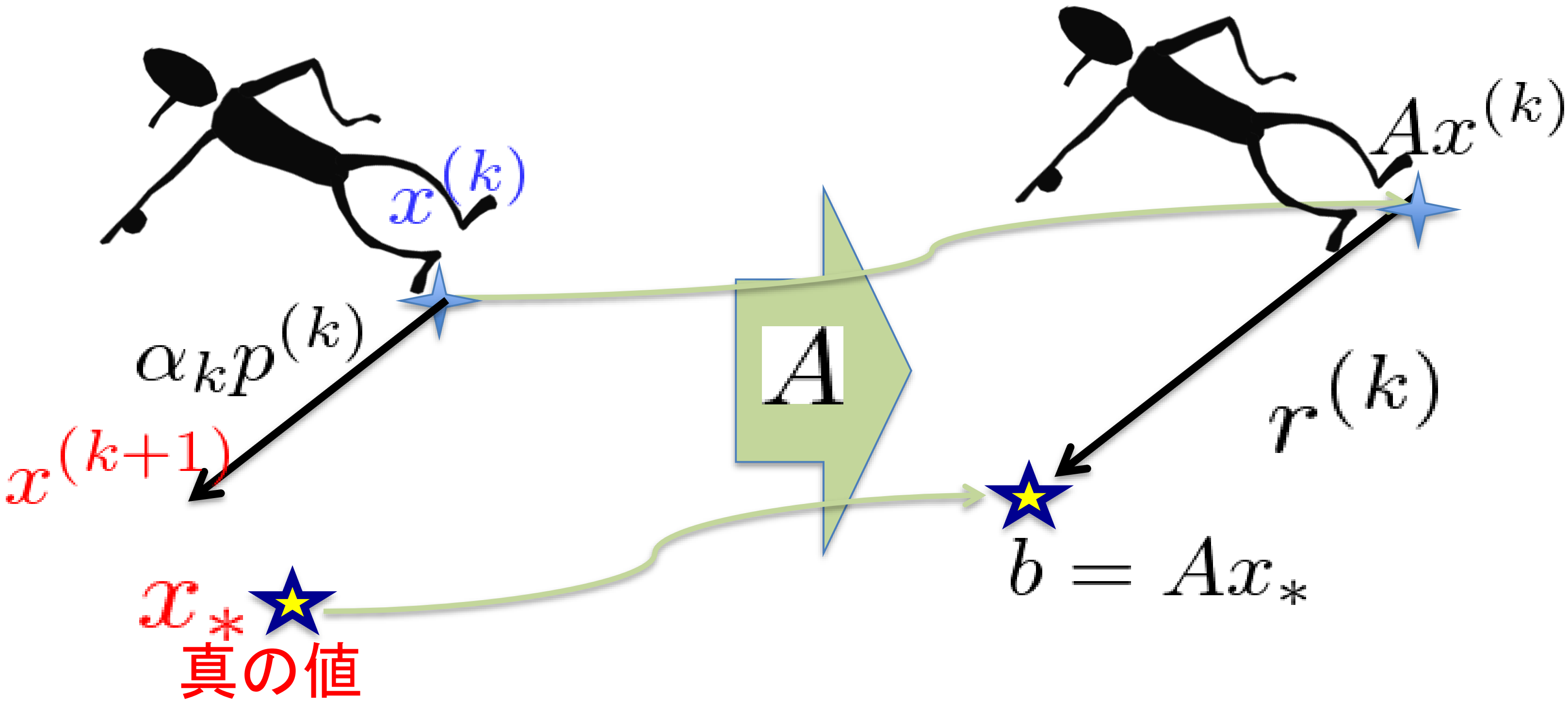
写像した先で行くべき方向は分かる



逐次最小下法の考え方：最急降下法

写像した先の残差方向を直接用いるのが最急降下法

写像した先で行くべき方向は分かる



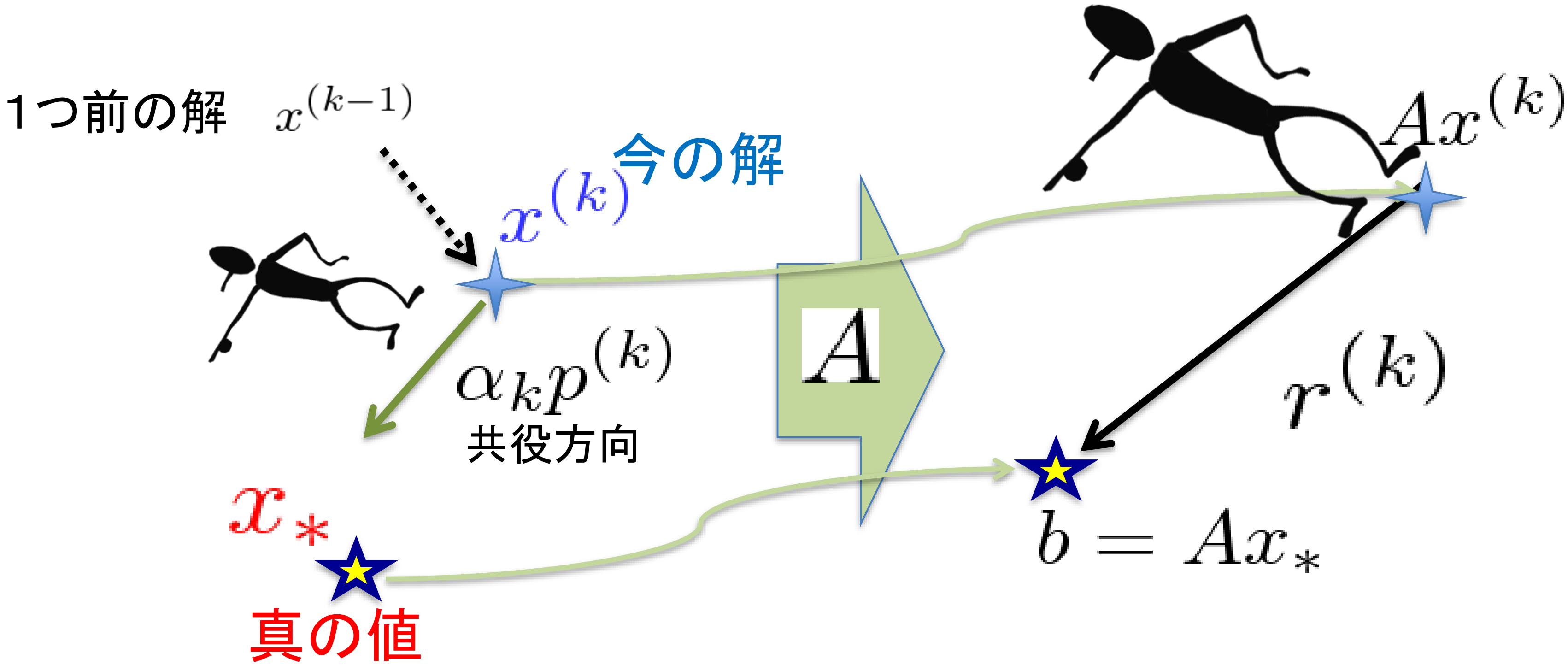
共役勾配法の考え方

写像した先の残差方向を1ステップ前の共役方向に修正して用いるのが共役勾配法

$$\beta_k;\ p^{(k+1)\top} A p^{(k)} = 0$$

$$p^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}$$

写像した先で行くべき方向は分かる



本日の内容

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

非対称な行列Aの共役勾配法の例

- CGNR法 : 正定値行列にする

$$Ax = b \;\Rightarrow\; A^\top A x = A^\top b$$

【デメリット】条件数が悪くなる

- Krylov 部分空間法
  - Krylov 部分空間を用いて残差ベクトルを処理する方法
  - 固有値を求める際にも利用

Krylov 部分空間

定義（Krylov 部分空間）

$u \in \mathbb{R}^n, \ \ A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が与えられており，

$u, Au, \cdots, A^{k-1}u \ (k \le n)$ が一次独立であるとき，

$$K_k(A;u) := \mathrm{span}\{u, Au, \cdots, A^{k-1}u\}$$

を A と u で生成されるKrylov部分空間という

Krylov 部分空間における直交基底生成法

$$u_j \in K_k(A;u),\ \ j = 1, 2, \cdots, k$$

- Arnoldi 過程

$$u_{k+1} = \mu_{k+1}\left\{ Au_k - \sum_{j=1}^{k} \frac{u_j^\top A u_k}{u_j^\top u_j} u_j \right\},\ \ u_1 = u$$

$$\mu_{k+1} \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$$

- Lanczos 過程: $A = A^\top$ の場合，Arnoldi過程は，

$$u_{k+1} = \mu_{k+1}\left\{ Au_k - \frac{u_k^\top A u_k}{u_k^\top u_k} u_k - \frac{u_{k-1}^\top A u_k}{u_{k-1}^\top u_{k-1}} u_{k-1} \right\},\ \ u_1 = u$$

$$\mu_{k+1} \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$$

Krylov 部分空間を利用した共役勾配法

- Aが対称行列と仮定する(簡単のため)
- 残差ベクトルを Lanczos 過程で直交化

$$r^{(j)} \in K_k(A; r^{(0)}),\ \ j = 0, 1, 2, \cdots, k-1$$

$$r^{(k)} = -\alpha_{k-1}\left\{ Ar^{(k-1)} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(r^{(j)})^\top Ar^{(k-1)}}{(r^{(j)})^\top r^{(j)}} r^{(j)} \right\},\ \ r_0 = b - Ax^{(0)}$$

□ 修正の方向: $p^{(k)} = r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)},\ \ \beta_{k-1} = \dfrac{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{(r^{(k-1)})^\top r^{(k-1)}}$

□ 修正の大きさ: $\alpha_k = \dfrac{(p^{(k)})^\top (b - Ax^{(k)})}{(p^{(k)})^\top Ap^{(k)}}$

□ 解の更新: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$

次回の講義

- 非線形方程式の数値解法
- 反復法の収束と誤差評価
- 代数方程式の根と微分