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6回
- 連立一次方程式の数値解法
- 非線形方程式の数値解法

本日の内容

- 連立一次方程式の数値解法(3)
  - 共役勾配法
  - Krylov部分空間法
- 非線形方程式の数値解法
  - Newton法
  - 反復法と収束
  - 反復法の誤差解析

逐次最小化法と最急降下法

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

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

✓ 逐次最小化法

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

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

✓ 最急降下法

逐次最小化法で，修正の方向を次のルールで選んだもの

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

デメリット: 数値誤差，収束速度 ⇒ **共役勾配法**

内積と直交性(共役性)

$A = A^\top > 0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が与えられているものとする.

このとき, 内積を次で定める:

$$\langle x, y\rangle_A := x^\top A y, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

$\langle x, y\rangle_A = 0$ を満たすベクトルの組があるとき, x, y は A に関して互いに直交, あるいは互いに共役であるという.

（参考：内積の数学的定義）

X : 実ベクトル空間

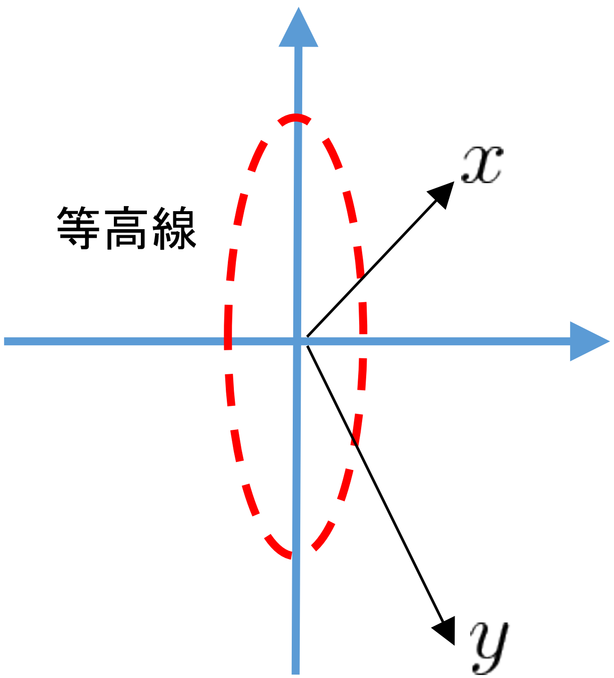
$\langle \bullet, \bullet\rangle : X \times X \to \mathbb{R}$ が内積であるとは, 次の条件を満たすことをいう.

(i) $\langle x, x\rangle \geq 0$ かつ $\langle x, x\rangle = 0$ は $x = 0$ のときのみ

(ii) $\langle \alpha w + \beta x, \gamma y + \delta z\rangle = \alpha\gamma\langle w, y\rangle + \alpha\delta\langle w, z\rangle + \beta\gamma\langle x, y\rangle + \beta\gamma\langle x, z\rangle, \quad \forall \alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}, \ \forall w, x, y, z \in \mathbb{R}^n$

(iii) $\langle x, y\rangle = \langle y, x\rangle, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$

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

共役勾配法の概念

解きたい問題: $$Ax_* = b,\ A = A^\top > 0$$

残差ベクトル: $$r^{(k)} := b - Ax^{(k)}$$

ノルムの同値性より

$$\|x_* - x^{(k)}\|_2 = 0 \Leftrightarrow \|x_* - x^{(k)}\|_A = 0 \Leftrightarrow \|r^{(k)}\|_2 = 0$$

- $x_* - x^{(k)}$:真値が不明なので計算できない(更新の方策が立てにくい)
- $r^{(k)} = \underbrace{b}_{=Ax_*} - Ax^{(k)}$:計算できる ⇒ これをゼロに近づけるアルゴリズムにすればよい

共役勾配法

✓ 修正方向の決め方 : Gram-Schmidt の直交化法

$$
\begin{aligned}
p^{(k)} &= r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}, \;\; k = 1, 2, \ldots \\
p^{(0)} &= b - A x^{(0)}
\end{aligned}
$$

$$\beta_{k-1} = -\frac{\langle p^{(k-1)}, r^{(k)} \rangle_A}{\langle p^{(k-1)}, p^{(k-1)} \rangle_A}$$

✓ 更新

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

$$\alpha_k = \frac{\langle p^{(k)}, r^{(k)} \rangle_I}{\langle p^{(k)}, p^{(k)} \rangle_A}$$ （逐次最小化法と同じ）

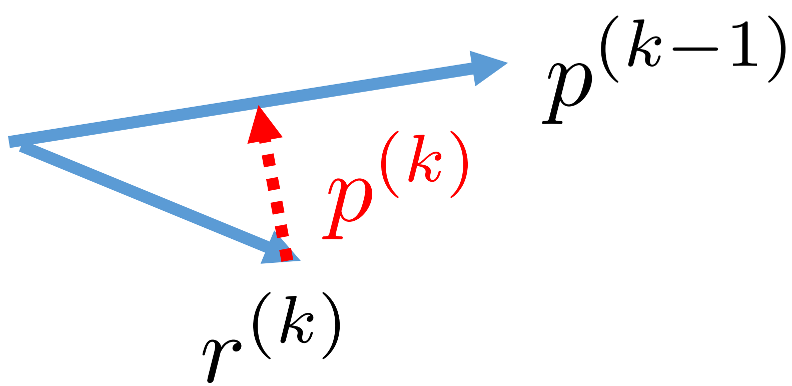
$$r^{(k+1)} = b - A x^{(k+1)}$$

修正の方向

✓ 修正方向の決め方：Gram-Schmidt の直交化法

$$\left.\begin{aligned} p^{(k)} &= r^{(k)} + \beta_{k-1} p^{(k-1)}, \ \ k = 1, 2, \ldots \\ p^{(0)} &= b - Ax^{(0)} \\ \beta_{k-1} &= -\frac{\langle p^{(k-1)}, r^{(k)} \rangle_A}{\langle p^{(k-1)}, p^{(k-1)} \rangle_A} \end{aligned}\right\} \ \langle p^{(k)}, p^{(k-1)} \rangle_A = 0$$

（イメージ：$A = I$ の場合）



修正の方向と残差ベクトルの関係

途中のステップ (*k* < *n*)

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, \ \ k = 1, 2, \ldots$$

$$r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)} = r^{(0)} - \sum_{i=0}^{k} \alpha_i A p^{(i)}$$

$$\alpha_k = \frac{\langle p^{(k)}, r^{(k)} \rangle_I}{\langle p^{(k)}, p^{(k)} \rangle_A}$$

修正ベクトルの作り方と係数から,

$$\langle p^{(k+1)}, p^{(k)} \rangle_A = 0, \quad \langle r^{(k+1)}, p^{(k)} \rangle_I = \langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle_I - \alpha_k \langle p^{(k)}, p^{(k)} \rangle_A = 0$$

$$\begin{aligned} \langle r^{(k+1)}, r^{(k)} \rangle_I &= \langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle_I - \alpha_k \langle p^{(k)}, r^{(k)} \rangle_A \\ &= \langle r^{(k)} - p^{(k)}, r^{(k)} \rangle_I = -\beta_{k-1} \langle p^{(k-1)}, r^{(k)} \rangle_I = 0 \end{aligned}$$

更新した残差が直交

一般化

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

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

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，

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

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，

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

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

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

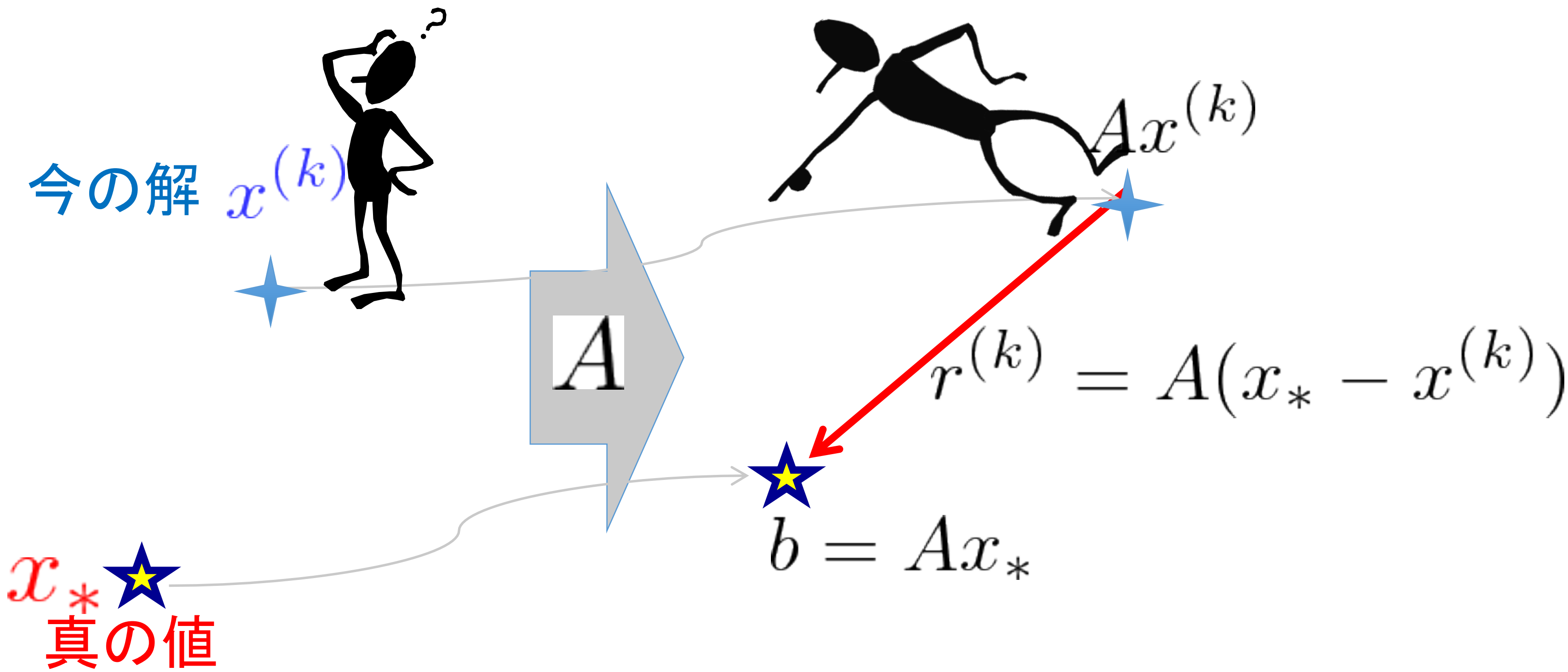
修正の方向
$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

$$\alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle_I}{\langle p^{(k)}, p^{(k)} \rangle_A}, \quad \beta_k = \frac{\langle r^{(k+1)}, r^{(k+1)} \rangle_I}{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle_I}$$

修正の大きさ　　　　修正の方向の更新

逐次最小化法の考え方

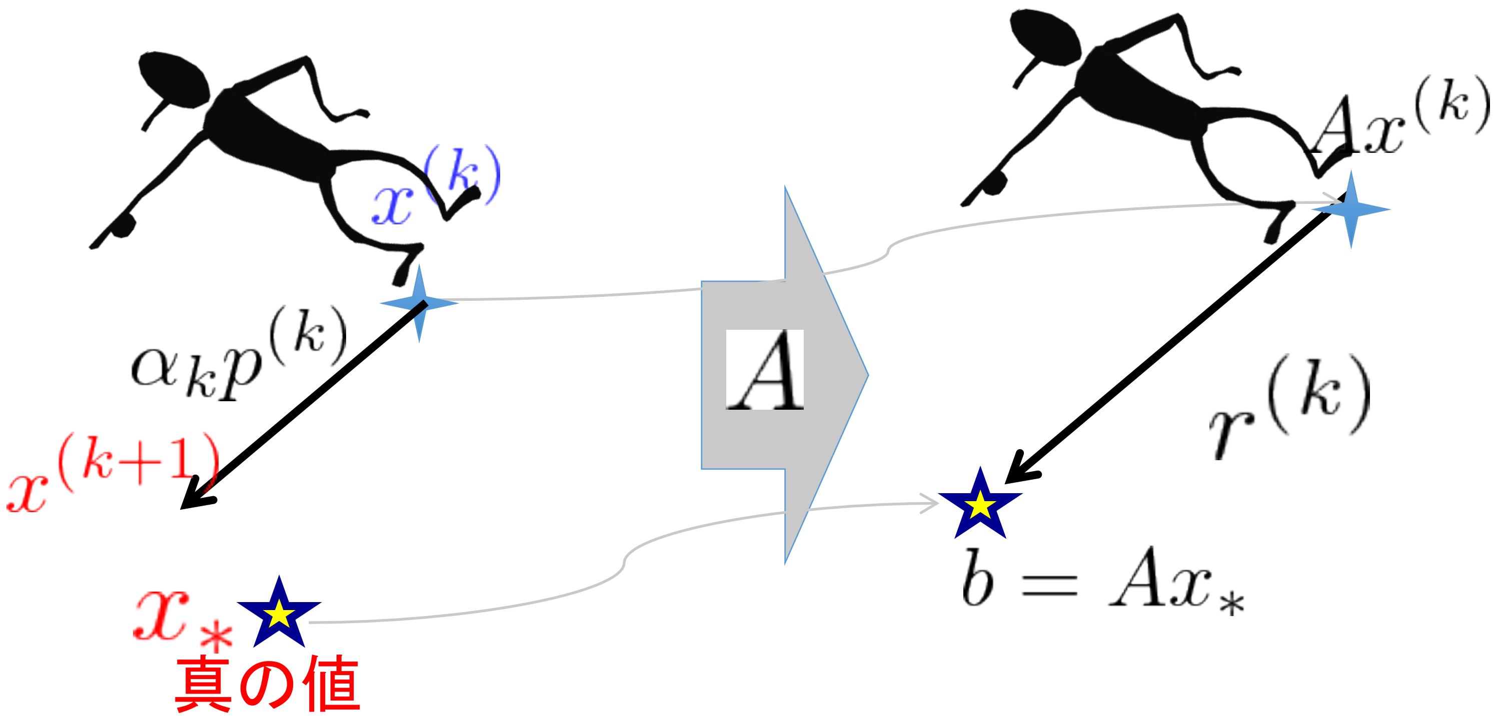
真の解がどこか分からない・・・ 写像した先で行くべき方向は分かる



逐次最小化の考え方: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



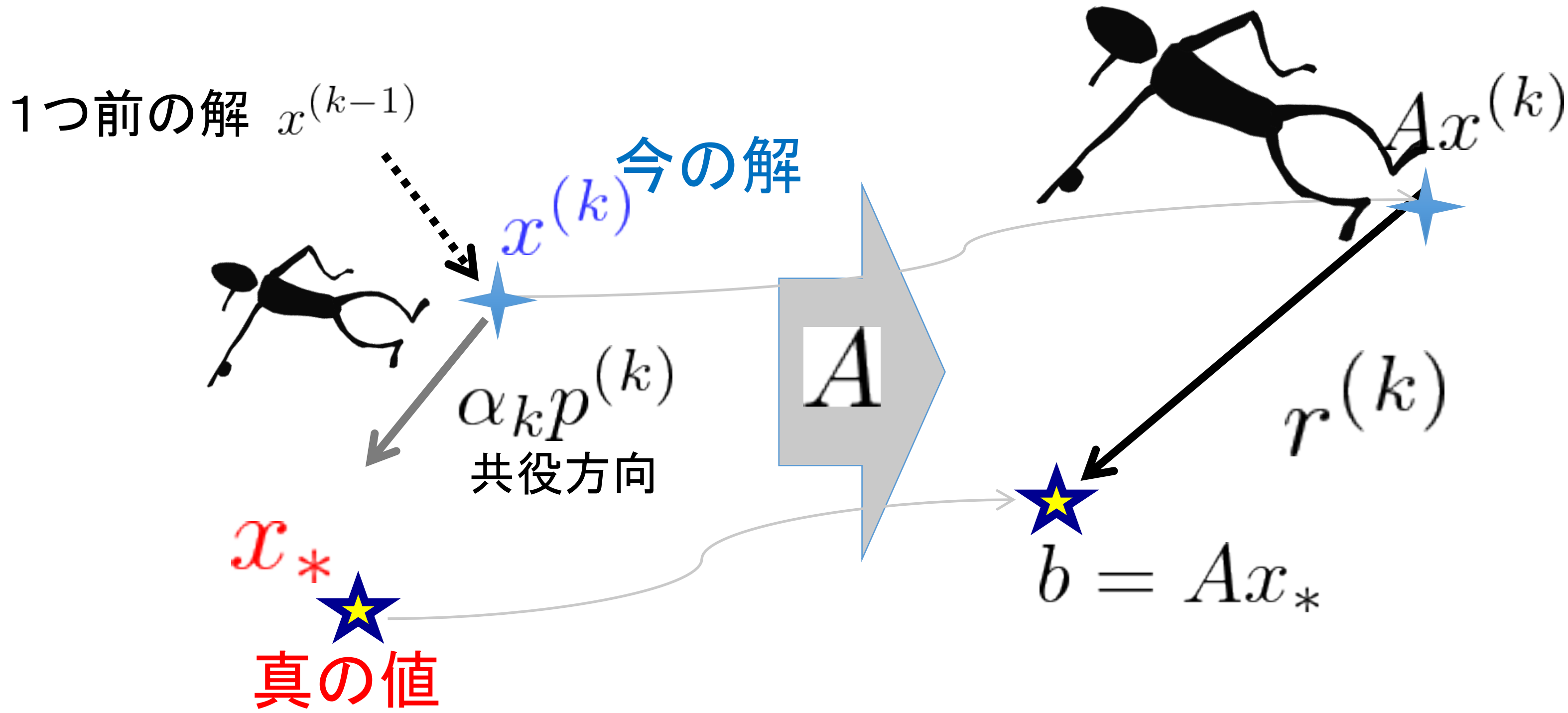
共役勾配法の考え方

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)
  - 共役勾配法
  - Krylov部分空間法
- 非線形方程式の数値解法
  - Newton法
  - 反復法と収束
  - 反復法の誤差解析

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,

$u, Au, \cdots, A^{k-1}u \ (k \leq n)$ 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

※ A が正定値とも対称とも仮定されないことに注意

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

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

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

□ Lanczos過程：　$A = A^\top$の場合，Arnoldi過程を整理して，

$$u_{k+1} = \mu_{k+1} \left\{ Au_k - \frac{\langle u_k, Au_k \rangle_I}{\langle u_k, u_k \rangle_I} u_k - \frac{\langle u_{k-1}, Au_k \rangle_I}{\langle u_{k-1}, u_{k-1} \rangle_I} u_{k-1} \right\},\ \ u_1 = u$$

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

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

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

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

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

□ 修正の大きさ: $\alpha_k = \frac{\langle p^{(k)}, r^{(k)} \rangle_I}{\langle p^{(k)}, Ap^{(k)} \rangle_I}$

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

本日の内容

- 連立一次方程式の数値解法(3)
  - 共役勾配法
  - Krylov部分空間法
- 非線形方程式の数値解法
  - Newton法
  - 反復法と収束
  - 反復法の誤差解析

最適化問題と代数方程式のゼロ点

- 理学・工学や実社会において，数理最適化はよく用いられる.
  - （例）適当な制約条件の下で，下の評価関数を最小化

$$S(x) = \frac{1}{2}(x - x_*)^\top A(x - x_*)$$

$$J(x) = \exp(\|x - x_*\|_2^2) - x^\top Ax$$

⇒ 最適性の必要条件： $\frac{\partial}{\partial x}S(x) = 0,\ \frac{\partial}{\partial x}J(x) = 0$

極値を精度よく求めることは，極めて重要

非線形方程式の数値解法

- 先ほどの極値を求める問題は，
  $f(x) = 0$を満たす $x \in \mathbb{R}^n$ を求める問題
- 代表的な方法として，Newton法
  - 線形近似して解を逐次更新していく

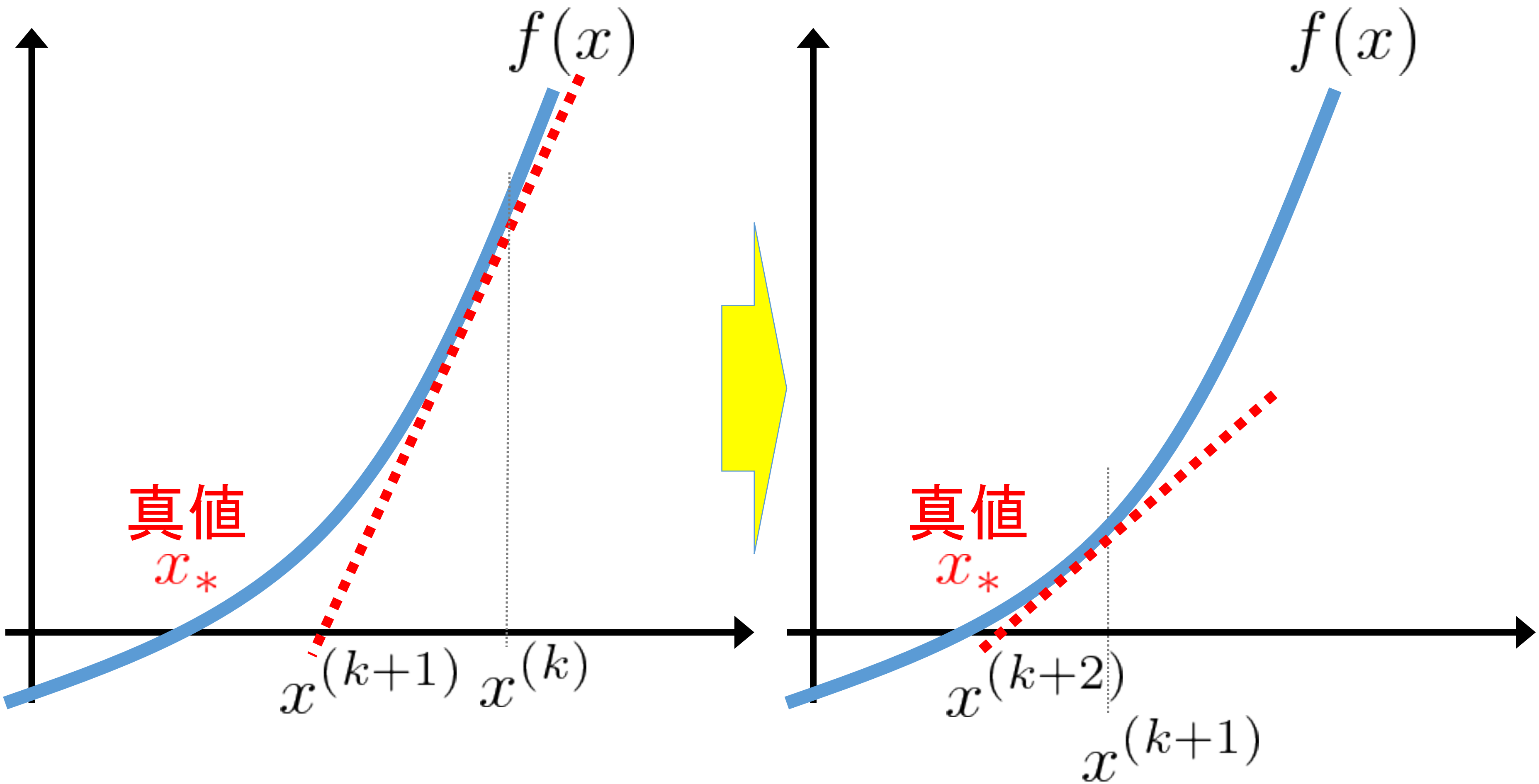
（例）1次元の場合

$$f(x) \simeq f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 0$$

$$\Rightarrow \quad x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$$

Newton法の幾何学的解釈

非線形の問題 ⇒ 線形の問題にして徐々に近づける



Newton法で扱える問題の例

- 平方根を求める問題: $f(x) = x^2 - a$
- n乗根を求める問題: $f(x) = x^n - a$
- 指数を求める問題: $f(x) = \log x - a$

n 変数方程式のNewton法

- 最適化問題だとn次元: $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

$$f(x) := \frac{\partial}{\partial x} S(x) \in \mathbb{R}^n$$

$$f(x) \simeq f(x^{(k)}) + J(x^{(k)})(x - x^{(k)}) = 0$$

$$J(x) := \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j}\right)_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial x^\top} S(x) \qquad \det J(x) \neq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{x_*\}$$

$$\Rightarrow \quad x^{(k+1)} = x^{(k)} - J^{-1}(x^{(k)}) f(x^{(k)})$$

Newton法の収束速度

- 前段の誤差の二乗に比例して小さくなる

$$x^{(k+1)} - x_* = J^{-1}(x^{(k)})O(\|x^{(k)} - x_*\|^2)$$

- J の正則性が成り立てば，二次収束が保証されるので，古くからよく使われている

反復法としてのNewton法

$\varphi(x) = \dfrac{1}{f'(x)}$ として，Newton 法は次の形で表せる

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}), \qquad \phi(x) = x - \underline{\varphi(x) f(x)}$$

なぜこの形か？

$x = \phi(x)$ ならば，$x = x - \varphi(x) \underbrace{f(x)}_{=0}$

解が収束すれば，方程式の根である

※ $\varphi(x) \neq 0$ は保証する必要がある

他の反復法による数値解法

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}), \quad \phi(x) = x - \varphi(x) f(x)$$

- Newton 法

各ステップで線形近似 $$\varphi(x) = \frac{1}{f'(x)}$$

- 線形逆補間法

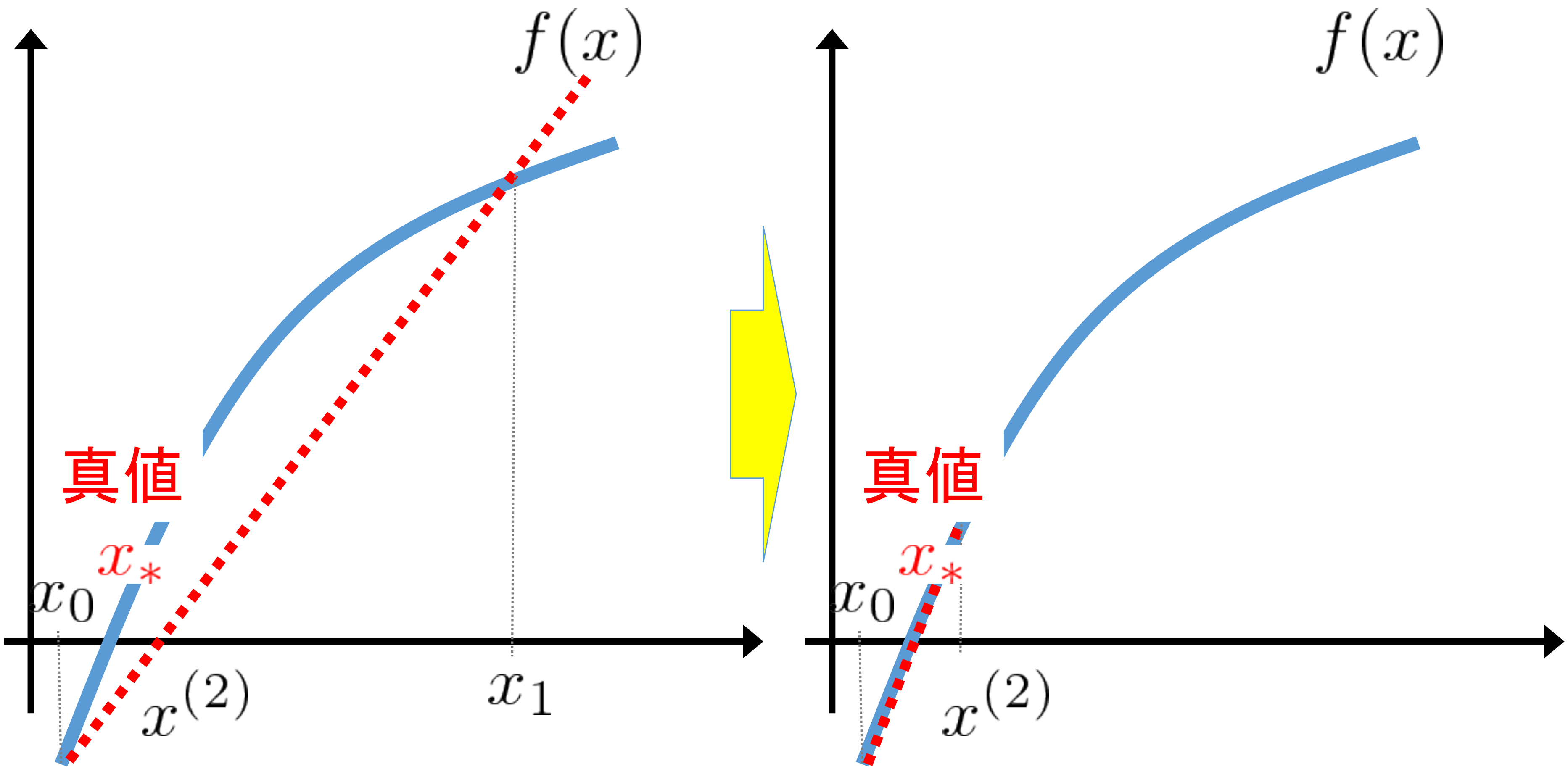
初期値のみでなく第一ステップの値も用いる $$\varphi(x) = \frac{x - x_0}{f(x) - f(x_0)}$$

- von Mises 法

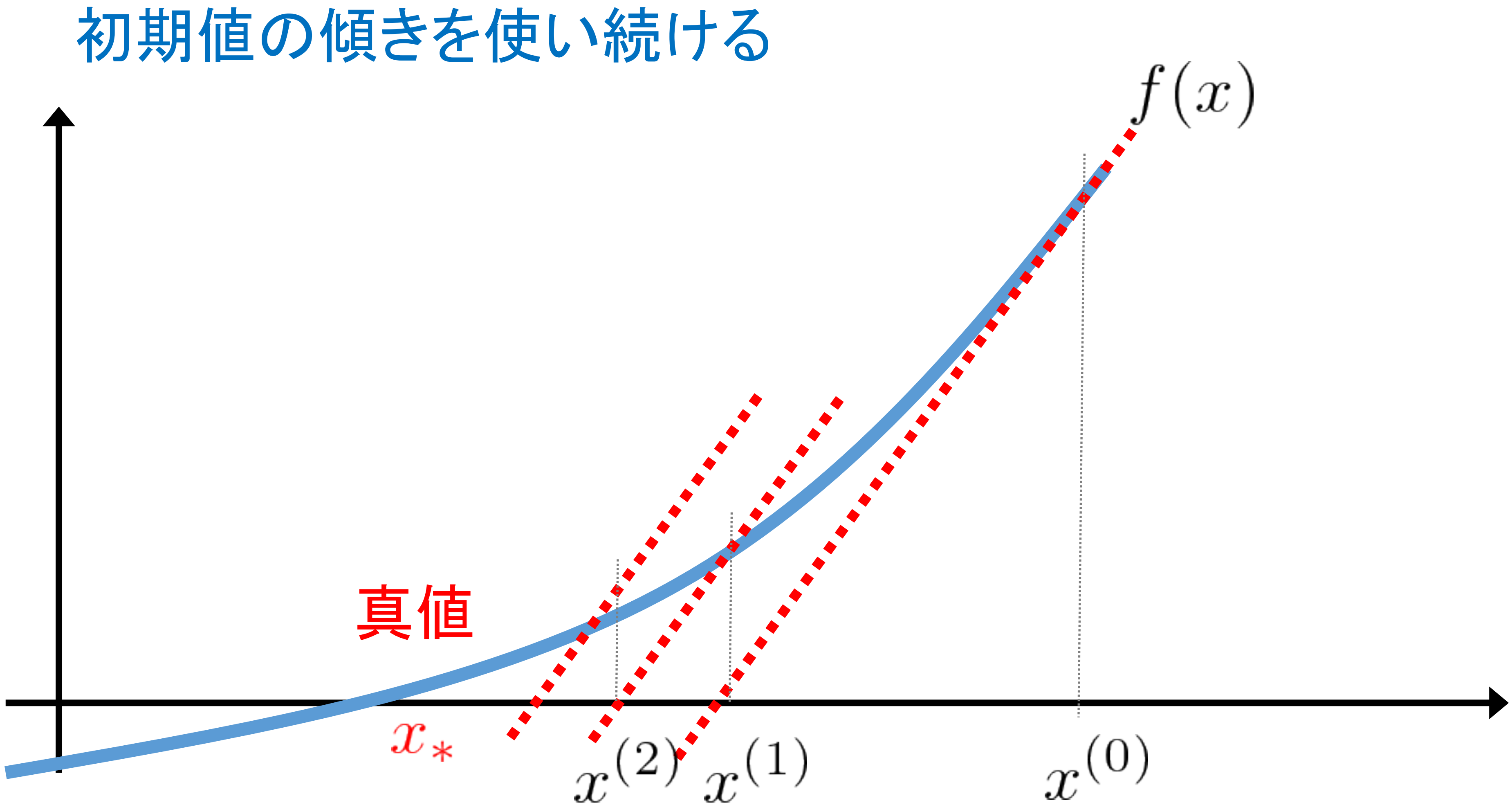
初期値の傾きをずっと使う $$\varphi(x) = \frac{1}{f'(x_0)}$$

線形逆補間法の幾何学的解釈

$f(x_0)f(x_1) < 0$ となるペア $x_0, x_1 \in \mathbb{R}$ を見つけておく



von Mises 法の幾何学的解釈



本日の内容

- 連立一次方程式の数値解法(3)
  - 共役勾配法
  - Krylov部分空間法
- 非線形方程式の数値解法
  - Newton法
  - 反復法と収束
  - 反復法の誤差解析

反復法の収束

- 反復法によって生成される数列が,
  求めたい解に近づかなければ意味がない

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

- 収束の議論は縮小写像の原理

縮小写像の原理（復習）

仮定

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

かつ, q は $0 < q < 1$

⇒ $x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)})$ で更新される解は

$x = \phi(x)$ を満たす唯一解に収束

$\mathbb{R}^n$ 全体で考えると，多くの写像が縮小写像にならない

定義域を制限した縮小写像

- 非線形方程式の場合，
  写像が縮小写像か否かは定義域にも依存する

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}) \qquad \phi(x) = x^2$$

$$x, y \in K = [0, 0.3], \ |\phi(x) - \phi(y)| \leq q|x - y|$$

⇨ ϕ は $K = [0, 0.3]$ 上で縮小写像

縮小写像の原理（定理2．1）

仮定

- $K \subset \mathbb{R}^n$ は閉領域かつ $\phi : K \to K$
- $\forall x, y \in K \subset \mathbb{R}^n, \ \|\phi(x) - \phi(y)\| \leq q\|x - y\|$

  かつ, q は $0 < q < 1$

⇒ $$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}), \quad x^{(0)} \in K$$

で更新される解は

$x = \phi(x)$ を満たす唯一解に収束

本日の内容

- 連立一次方程式の数値解法(3)
  - 共役勾配法
  - Krylov部分空間法
- 非線形方程式の数値解法
  - Newton法
  - 反復法と収束
  - 反復法の誤差解析

反復法の誤差解析

丸め誤差なし $x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)})$

丸め誤差あり $y^{(k+1)} = \phi(y^{(k)}) + \epsilon^{(k)}$

丸め誤差

仮定 $\|\epsilon^{(k)}\| \leq \epsilon,\ k = 1, 2, \cdots$

$$\|y^{(N)} - x_*\| \leq \frac{1}{1-q}\left\{q^N \|\underline{\phi(x^{(0)})} - x^{(0)}\| + \epsilon\right\}$$

教科書の評価

これは分からない・・・

反復法の誤差解析：修正版

$$y^{(1)} - x^{(0)} = \phi(x^{(0)}) - x^{(0)} + \epsilon^{(0)}$$

$$\Rightarrow y^{(1)} - x^{(0)} - \epsilon^{(0)} = \phi(x^{(0)}) - x^{(0)}$$

$$\|\phi(x^{(0)}) - x^{(0)}\| \leq \|y^{(1)} - x^{(0)}\| + \epsilon$$

$$\|y^{(N)} - x_*\| \leq \frac{1}{1-q}\left\{q^N\left(\|y^{(1)} - x^{(0)}\| + \epsilon\right) + \epsilon\right\}$$

初期値，事前情報（丸め誤差の大きさ），第一ステップの値のみで評価可能

初期値の選択

- 反復法の収束は，適切な初期値の選択が重要

$$T_1 = \{y \mid \|y - x^{(0)}\| \leq \rho\}$$

$\boxed{\text{仮定}}$ $\quad \|\phi(x^{(0)}) - x^{(0)}\| + \epsilon \leq (1-q)\rho$

丸め誤差の大きさ

$q^N \leq 1$ より，

$$\Rightarrow \quad \|y^{(N)} - x_*\| \leq \frac{1}{1-q}\left\{\|\phi(x^{(0)}) - x^{(0)}\| + \epsilon\right\} \leq \rho$$

初期値の選択:修正版

$$T_1 = \{y \mid \|y - x^{(0)}\| \leq \rho\}$$

$\boxed{\text{仮定}}$ $\|y^{(1)} - x^{(0)}\| + 2\epsilon \leq (1-q)\rho$

$$\Rightarrow \quad \|y^{(N)} - x_*\| \leq \frac{1}{1-q}\left\{\|y^{(1)} - x^{(0)}\| + 2\epsilon\right\} \leq \rho$$

よって, $y^{(N)} \in T_1, \ N = 1, 2, \cdots$

初期値を十分に真値に近くとる工夫が大事

次回の講義予定

- 代数方程式の数値解法