２００5年５月１8日（水）

数値解析講義　前期水曜３限
3年（2005）

青柳　睦
aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター５階５０２

講義内容

｛括弧｝の項目はSkipまたは参考程度

１．超越方程式（非線形方程式）の解法

１．１　2分法　→　演習

１．２　｛補間法｝

１．３　ニュートン法　→　演習

２．代数方程式の解法

２．１　グラーフェの方法　→　（~~演習~~）

２．２　｛ベルヌーイの方法｝

３．連立一次方程式の解法

３．１　行列計算　→　演習

３．２　ガウスの消去法　→　演習

３．３　３重対角行列の場合の解法

３．４　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学(社会学？)分野で活用されている計算科学の概論を紹介します（予定）．

３．５ ｛特異値分解法｝

３．６ 共役勾配法

３．７ 反復法

４．固有値と固有ベクトルの近似計算

４．１ レバリエールの方法

４．２ ３重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算

４．３ ランチョスの方法（３重対角行列への帰着）

４．４ ギブンスの方法（対称な３重対角行列への帰着）

４．５ ヤコビの方法（対角行列への帰着）

５．ラグランジュの未定乗数法

６．勾配法

６．１ 最急降下法

６．２ 最急降下加速法

６．３ ステップ幅の決め方

4章 「固有値・・」以降は，講義と演習の進捗状況によっては項目を絞った内容にする可能性があります・・．

成績評価，その他

- 出席点５割＋前期末試験５割
- 講義ノートは，毎回配りますが
  もし欠席したら各自でDLしてください
  server-500.cc.kyushu-u.ac.jp
  （講義ノートはその週の金曜日１７時までには公開）
- 次回から座席指定でお願いします
  ３０分後には座席表から出欠を取ります
- 研究室の電話は 092-642-3838
- メールは，aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp
  Subjectには，「数値解析」と記入
  してください

３．４ LU 分解法（先週の復習）

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$b = {}^t(b_1, b_2, \ldots, b_n)$$

$$A = LU$$

L：下半三角行列

U：上半三角行列

$$L = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & 0 \\ & \cdots & & \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1n} \\ 0 & \beta_{22} & \cdots & \beta_{2n} \\ & \cdots & & \\ 0 & \cdots & & \beta_{nn} \end{pmatrix},$$

3行3列の場合を例に・・（α_{11}=1）未知要素が決まる順番，緑→青→赤→水色→黄色

$$A = LU = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ 0 & \beta_{22} & \beta_{23} \\ 0 & 0 & \beta_{33} \end{pmatrix}$$

$(i < j)$

$$\alpha_{11}\beta_{12} = a_{12} \qquad \alpha_{11}\beta_{13} = a_{13} \qquad \alpha_{21}\beta_{13} + \alpha_{22}\beta_{23} = a_{23}$$

$(i = j)$

$$\alpha_{11}\beta_{11} = a_{11} \qquad \alpha_{31}\beta_{13} + \alpha_{32}\beta_{23} + \alpha_{33}\beta_{33} = a_{33}$$

$$\alpha_{21}\beta_{12} + \alpha_{22}\beta_{22} = a_{22}$$

$(i > j)$

$$\alpha_{21}\beta_{11} = a_{21} \qquad \alpha_{31}\beta_{11} = a_{31} \qquad \alpha_{31}\beta_{12} + \alpha_{32}\beta_{22} = a_{32}$$

$$A=LU=\begin{pmatrix} \alpha_{11} & & & & & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & & & \cdots & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & & & 0 \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} & & 0 \\ & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} & \alpha_{n4} & \cdots & \alpha_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} & & \beta_{1n} \\ & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} & \cdots & \beta_{2n} \\ & & \beta_{33} & \beta_{34} & & \beta_{3n} \\ & & & \beta_{44} & & \beta_{4n} \\ & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_{nn} \end{pmatrix},$$

$$i<j \qquad \alpha_{21}\beta_{14}+\alpha_{22}\beta_{24}=a_{24} \qquad \Rightarrow \beta_{24}$$

$$i=j \qquad \alpha_{31}\beta_{13}+\alpha_{32}\beta_{23}+\alpha_{33}\beta_{33}=a_{33} \qquad \Rightarrow \beta_{33}$$

$$i>j \qquad \alpha_{41}\beta_{12}+\alpha_{42}\beta_{22}=a_{42} \qquad \Rightarrow \alpha_{42}$$

$i < j$　のとき、

$$\alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \ldots + \alpha_{ii}\underline{\beta_{ij}} = a_{ij}$$

$i = j$　のとき、

$$\alpha_{i1}\beta_{1i} + \alpha_{i2}\beta_{2i} + \ldots + \alpha_{ii}\underline{\beta_{ii}} = a_{ii}$$

$i > j$　のとき、

$$\alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \ldots + \underline{\alpha_{ij}}\beta_{jj} = a_{ij}$$

β_{ij} と α_{ij} を計算するアルゴリズム

(i) $\alpha_{ii} \equiv 1, \quad i = 1,2,\ldots,n$

(ii) $j = 1,2,\ldots,n$ のそれぞれに対して、

$$\beta_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik}\beta_{kj}, \quad i = 1,2,\ldots,j$$

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\beta_{jj}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik}\beta_{kj}\right), \quad i = j+1, j+2,\ldots,n$$

β_{ij} と α_{ij} の計算でのポイント

(a) α_{ij} を求めるには $a_{ij}, \alpha_{ik}\left(k < i\right), \beta_{kj}\left(k = 1, \cdots, j\right)$ が必要

(b) β_{ij} を求めるには $a_{ij}, \beta_{kj}\left(k < j\right), \alpha_{ik}\left(k = 1, \cdots, i\right)$ が必要

(c) a_{ij} は α_{ij} または β_{ij} の計算以外では参照されない

(d) $\alpha_{ii} = 1 (i = 1, 2, \ldots, n)$ は配列に入れる必要なし

LU 分解による解法手順

(1)　α_{ij}, β_{ij} を求め配列 A を置き換える（LU 分解）

(2)　$Ly = b$ から y を求める（前進代入）

$$y_1 = \frac{b_1}{\alpha_{11}}, \quad y_i = \frac{1}{\alpha_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j\right), \quad i = 2,3,\ldots,n$$

(3)　$Ux = y$ から x を求める（後進代入）

$$x_n = \frac{y_n}{\beta_{nn}}, \quad x_i = \frac{1}{\beta_{ii}}\left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} \beta_{ij} x_j\right), \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

LU 分解のプログラム

for $j=1 \to n$ 列についてのループ

for $i=1 \to j$ 行についてのループ

$sum = a_{ij}$

for $k=1 \to i\text{-}1$

$sum = sum - a_{ik} * a_{kj}$

$\beta_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik}\beta_{kj}$ の計算

$a_{ij} = sum$ 　a_{ij}をβ_{ij}で置き換える

for $i = j+1 \to$ n 行についてのループ

$sum = a_{ij}$

for $k=1 \to j\text{-}1$

$sum = sum - a_{ik} * a_{kj}$

$\alpha_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik}\beta_{kj} \right) / \beta_{jj}$ の計算

$a_{ij} = sum / a_{jj}$ 　a_{ij}をα_{ij}で置き換える

３．５　特異値分解法（参考まで）

まず一般理論は･･

$A : m \times n \, (m \geq n)$ 行列

$U \; : m \times n$　　直交行列

$D : n \times n$　　対角行列

$V \; : n \times n$　　直交行列

$$A = UD\,{}^{t}V$$ と分解する。

$$U = \left(u_1 \; u_2 \cdots u_n\right),$$

$$u_j = {}^t(u_{1j}, u_{2j}, \ldots, u_{mj})$$

$u_j,\ j = 1,2,\ldots,n$: 正規直交ベクトル

すなわち、 $(u_j, u_k) = \delta_{jk}$

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & & & & 0 \\ & d_2 & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ 0 & & & & d_n \end{pmatrix}$$

対角行列

（Wと記述することもある・・）

$$V = \left(v_1 \ v_2 \cdots v_n\right),$$

$$v_j = {}^t(v_{1j}, v_{2j}, \ldots, v_{nj})$$

$v_j, \ j = 1,2,\ldots, n:$ 正規直交ベクトル

すなわち、$(v_j, v_k) = \delta_{jk}$

$${}^tUU = {}^tVV = I$$

特異値分解の一般論の補足(参考)

$A : m \times n \ (m \geq n)$ 行列

に対して

$B = {}^t\! AA : n \times n$ 対称行列

を考える。

正定値2次
形式

$B = {}^t\! AA$ から任意の x に対して

$${}^t x Bx = {}^t x\, {}^t\! AAx = \| Ax \|^2 \geq 0$$

であるがここでは簡単のため $x \neq 0$ に対して

${}^t x Bx > 0$　正定値

とする。

対称行列に対する線形代数「固有値と固有ベクトル」
の考察から　次のi）、ii）が成り立つ （4章）

i） n個のでない0でない（実の）固有ベクトル

$$v_i = {}^t(v_{1i}, \cdots, v_{ni})\ (i = 1, \cdots, n)$$

とその固有値λ_i（実数）が存在して

$$Bv_i = \lambda_i v_i$$

ii） v_i は正規直交となるように選べる。すなわち

$${}^t v_i v_j = \delta_{ij}$$

ここで

$$V = (v_1, v_2, \cdots, v_n) : n \times n \text{ 行列}$$

とすると

$${}^t VV = I \text{ ：直交行列}$$

B の正定値性を仮定したので

$$\lambda_i = \lambda_i {}^t v_i v_i = {}^t v_i B v_i > 0$$

となる。

そこで $w_i = \sqrt{\lambda_i}$ と書くことにし、m 次元ベクトル

$$u_i = {}^t (u_{1i}, \cdots, u_{mi})$$

を

$$A v_i = w_i u_i$$

で定義する。このとき

$$ {}^t A u_i = ({}^t A A v_i) / w_i = (\lambda_i v_i) / w_i = w_i v_i$$

$$A {}^t A u_i = w_i A v_i = w_i^2 u_i = \lambda_i u_i$$

だから u_i は $A {}^t A$ の固有ベクトルとなる

また、

$$ {}^t u_i u_j = ({}^t v_i {}^t A A v_j)/(w_i w_j) = (\lambda_j {}^t v_i v_j)/(w_i w_j) $$

$$ = (\lambda_j \delta_{ij})/(w_i w_j) = \delta_{ij} $$

だから u_i も正規直交ベクトルとなる

ここで

$$ U = (u_1, u_2, \cdots, u_n) : m \times n \text{行列} $$

とすると

$$ {}^t U U = I $$

次に、これらを用いると

$$A = \sum_{i=1}^{n} w_i u_i {}^t v_i = UW {}^t V$$

となることを示す。

n 個のn次元ベクトル v_j $(j = 1, \cdots, n)$ は直交するから

任意の n 次元ベクトル x は v_j によって

$$x = \sum_{j=1}^{n} \xi_j v_j \qquad (\xi_j = {}^t v_j x)$$

と展開できる。ここで

$$\left(A - \sum_{i=1}^{n} w_i u_i{}^t v_i \right) x = A\left(\sum_{j=1}^{n} \xi_j v_j \right) - \left(\sum_{i=1}^{n} w_i u_i{}^t v_i \right)\left(\sum_{j=1}^{n} \xi_j v_j \right)$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \xi_j A v_j - \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \xi_j w_i u_i{}^t v_i v_j$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \xi_j w_j u_j - \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \xi_j w_i u_i \delta_{ij}$$

$$= 0$$

となる。ここでxは任意だから

$$A - \sum_{i=1}^{n} w_i u_i{}^t v_i = 0 \qquad \therefore\ A = \sum_{i=1}^{n} w_i u_i{}^t v_i$$

行列を用いて書くと

$$A = \sum_{i=1}^{n} w_i u_i {}^t v_i$$

$$= \overbrace{\begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1n} \\ u_{21} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ u_{m1} & \cdots & u_{mn} \end{pmatrix}}^{m \times n} \overbrace{\begin{pmatrix} w_1 & & \cdots & 0 \\ & w_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & \cdots & w_n \end{pmatrix}}^{n \times n} \overbrace{\begin{pmatrix} v_{11} & v_{21} & \cdots & v_{n1} \\ v_{12} & v_{22} & \cdots & v_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{1n} & v_{2n} & \cdots & v_{nn} \end{pmatrix}}^{n \times n}$$

$$= UW\,{}^tV$$

これらの表現を行列 A の特異値分解、w_i を特異値という。

$m = n$ かつ Aが対称行列の場合、

LU分解法との関係を考える

$$D = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & & & & \\ & a_{22}^{(2)} & & 0 & \\ & & a_{33}^{(3)} & & \\ & 0 & & \ddots & \\ & & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

とおくと‥

LU分解法における
上三角行列：

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ & 0 & & \ddots & \vdots \\ & & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

は‥

$$V = \begin{pmatrix} 1 & v_{12} & v_{13} & \cdots & v_{1n} \\ & 1 & v_{23} & \cdots & v_{2n} \\ & & 1 & \cdots & v_{3n} \\ & 0 & & \ddots & \vdots \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \qquad v_{kj} = \frac{a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, (k < j)$$

ここでAが対称　$^{t}A = A$

かつ、正則な場合を考える。

$AX = XA = E$(単位行列) を満たす行列Xが存在する時、Aを正則行列という。

正則な対称行列においては、Gaussの消去法でkステップ目に表れる、（いまだ消去されていない）k行以下の部分行列に関しても「対称性」が保たれている。

（証明）

第kステップまで消去された状態で、いまだ消去されていないk行以下の部分行列に着目する‥

$$
\begin{pmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
 & & \ddots & & & & \\
 & & & \boxed{a_{kk}^{(k)}} & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k,n}^{(k)} \\
 & 0 & & a_{k+1,k}^{(k)} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\
 & & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 & & & a_{nk}^{(k)} & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)}
\end{pmatrix}
$$

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{kk}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k,n}^{(k)} \\ a_{k+1,k}^{(k)} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{nk}^{(k)} & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \dfrac{a_{i,k-1}^{(k-1)}}{a_{k-1,k-1}^{(k-1)}} a_{k-1,j}^{(k-1)}$である、

ここで　$a_{ij}^{(k)} = a_{ji}^{(k)}$を仮定すると、

$$a_{ji}^{(k+1)} = a_{ji}^{(k)} - \frac{a_{j,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}} a_{k,i}^{(k)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{k,i}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}} a_{j,k}^{(k)} = a_{ij}^{(k+1)}$$

よって、$a_{ij}^{(k)} = a_{ji}^{(k)}$ならば$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ji}^{(k+1)}$が成り立つ。

一方$A^{(1)}(= A)$は対称行列、$a_{ij}^{(1)} = a_{ji}^{(1)}$であるから

すべてのステップ(k)で対称性は保存される。

以上より、Aが対称行列のとき、LU分解法における
上三角行列を対角行列Dで割ったV行列の各要素は‥

$$v_{kj} = \frac{a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} = \frac{a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} = m_{jk}$$ となる、したがって・・

$$V = {}^{t}L$$

$$A = LD\,{}^{t}L$$

Aが対称で正則な場合の、特異値分解となる

m_{jk} ： **前節「（補足） Gaussの前進消去プロセスとLU分解の関係」を参照のこと。**

３．６　共役勾配法

仮定１　$A = {}^tA$　　対称行列

仮定２　${}^txAx > 0, \quad x \neq 0$　　正定値行列

$$Ax = b$$

もし、A が仮定を満たさなければ

$$ {}^tAAx = {}^tAb $$

を考えればよい。

$Ax = b$ の解 ξ は次の最小化問題の解である:

$$F(\xi) = \min_{x} F(x), \quad F(x) = \frac{1}{2}\,{}^t x A x - {}^t x b$$

証明。$x = \xi + \varepsilon$ とおくと、

$$\begin{aligned} F(x) &= F(\xi + \varepsilon) \\ &= \frac{1}{2}({}^t\xi A\xi + {}^t\xi A\varepsilon + {}^t\varepsilon A\xi + {}^t\varepsilon A\varepsilon) - {}^t\xi b - {}^t\varepsilon b \\ &= F(\xi) + {}^t\varepsilon A\varepsilon / 2 \ \geq F(\xi) \end{aligned}$$

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

を $F(x)$ に代入すると、

$$F(x^{(k+1)}) = \frac{1}{2} {}^t U_k A U_k \lambda_k^2 - {}^t U_k R_k \lambda_k + F(x^{(k)})$$

ただし、 R_k は次で与えられる。

$$R_k = b - Ax^{(k)}$$

$F(x^{(k+1)})$ を最小にする λ_k は

$$\lambda_k = \frac{{}^t U_k R_k}{{}^t U_k A U_k}$$ によって与えられる。

ここで、次式が成り立つ。 $\boxed{{}^t U_{k-1} R_k = 0}$ …①

【証明】

$${}^t U_{k-1} R_k = {}^t U_{k-1}(b - Ax^{(k)}) = {}^t U_{k-1} b - {}^t U_{k-1} A x^{(k)}$$

$$= {}^t U_{k-1} b - {}^t U_{k-1} A(x^{(k-1)} + \lambda_{k-1} U_{k-1})$$

$$= {}^t U_{k-1}(b - Ax^{(k-1)}) - \lambda_{k-1} {}^t U_{k-1} A U_{k-1}$$

$$= {}^t U_{k-1} R_{k-1} - \lambda_{k-1} {}^t U_{k-1} A U_{k-1}$$ λ_{k-1} の定義より

$$= 0$$

適当な $x^{(0)}$ から出発し、順次修正を加える

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \underbrace{\lambda_k}_{\text{大きさ}} \underbrace{U_k}_{\text{方向}}$$

$x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)} \cdots$ が $F(x)$ の最小値を与える解 ξ に収束

U_k が決まれば $F(x^{(k)} + \lambda_k U_k)$ を最小にする λ_k は

$$\frac{d}{d\lambda}\left[F(x^{(k)} + \lambda_k U_k)\right] = 0$$ から $$\lambda_k = \frac{{}^t U_k R_k}{{}^t U_k A U_k}$$

U_k として何が適当か？　　明確な回答はないが・・

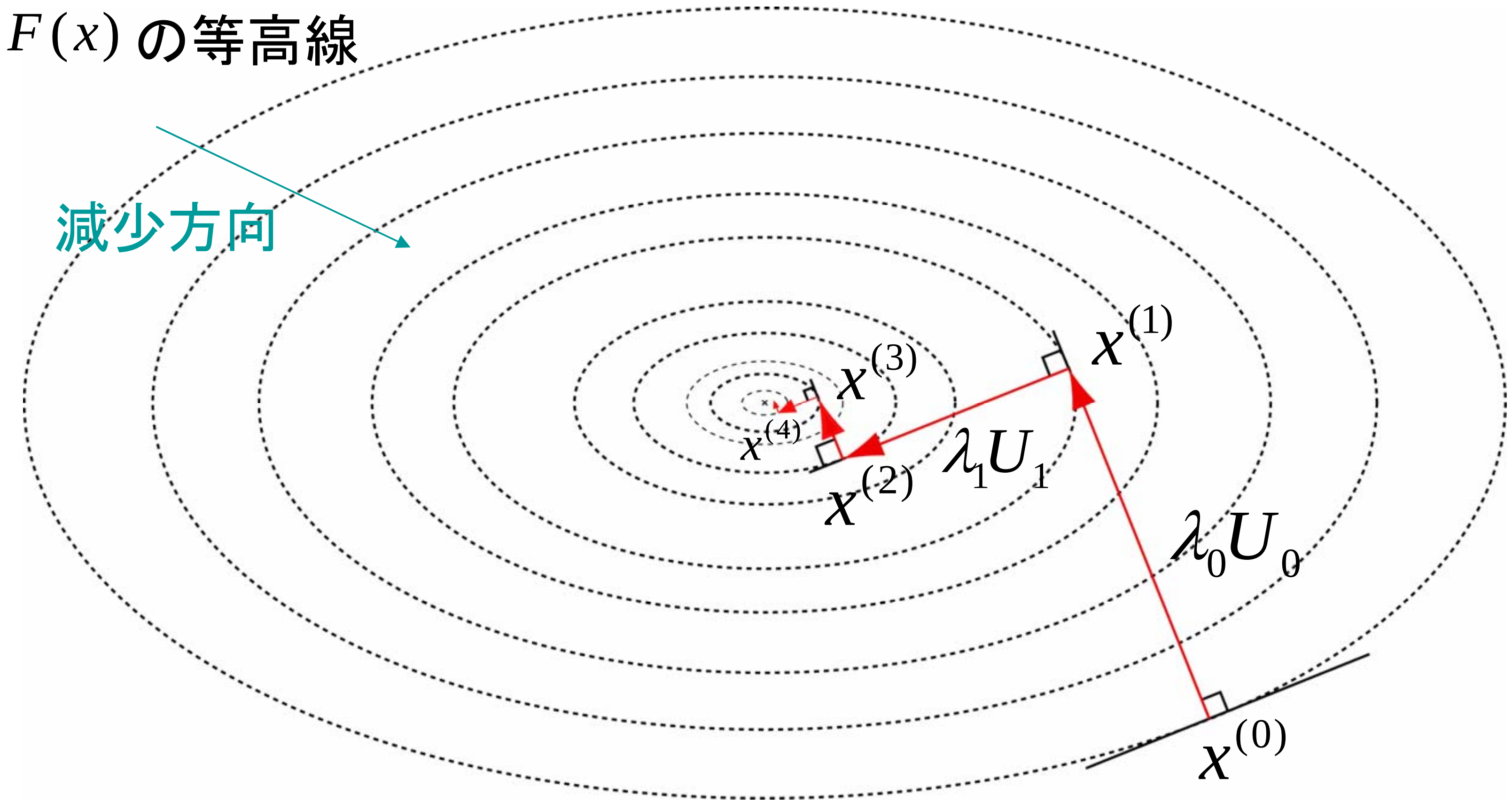
ひとつの（もっともらしい）方法

$U_k = R_k = b - Ax^{(k)}$（残差）とする

R_k : 勾配の逆方向 （ $F(x)$ が最も減少する方向）

$$R_k = b - Ax^{(k)} = \begin{pmatrix} -\dfrac{\partial}{\partial x_1^{(k)}} F(x^{(k)}) \\ \vdots \\ -\dfrac{\partial}{\partial x_N^{(k)}} F(x^{(k)}) \end{pmatrix} = -\nabla F(x^{(k)})$$

2次元の問題で $U_k = R_k$ とした場合（<u>最急降下法</u>）



実際には…

$x^{(0)}$ によっては収束が遅い ⟶ あまり得策ではない

$U_k = R_k$ を少し変更して

$U_k = R_k + \mu_k U_{k-1}$ とする

μ_kを共役関係　${}^t U_{k-1} A U_k = 0$　から指定すると,

$$\mu_k = \frac{{}^t R_k R_k}{{}^t R_{k-1} R_{k-1}}$$

となる(ことを後で示す)

このように U_k を順次,改良してゆくスキームを

共役勾配法と呼ぶ.

まず後で使う式・・ $\boxed{R_{k+1} = R_k - \lambda_k A U_k}$ を示す.

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

両辺にAを掛けて、bから引くと

$R_k = b - Ax^{(k)}$ より・・

$$R_{k+1} = R_k - \lambda_k A U_k \quad \cdots ②$$

U_k を次の反復式で決める。

$$U_k = R_k + \mu_k U_{k-1}$$

μ_k を決めるために、共役関係

$${}^tU_{k-1} A U_k = 0$$

を課す。この関係より、

$$0 = -{}^tU_{k-1}\lambda_{k-1} A U_k$$

$$= -{}^t(A\lambda_{k-1}U_{k-1})U_k$$

②により

$$= {}^t(R_k - R_{k-1})(R_k + \mu_k U_{k-1})$$

これより、

$$\mu_k = \frac{{}^t(R_k - R_{k-1})R_k}{{}^tR_{k-1}U_{k-1}} \qquad (\because ①より\ {}^tR_kU_{k-1} = 0\ )$$

ここで、次の二つのことを示す。

$${}^tR_{k-1}U_{k-1} = {}^tR_{k-1}R_{k-1},$$

$${}^tR_{k-1}R_k = 0$$

まず

$$\begin{aligned}{}^tR_{k-1}U_{k-1} &= {}^tR_{k-1}(R_{k-1} + \mu_{k-1}U_{k-2}) \\ &= {}^tR_{k-1}R_{k-1}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
{}^tR_{k-1}R_k &= {}^t(U_{k-1} - \mu_{k-1}U_{k-2})R_k \\
&= -\mu_{k-1}{}^tU_{k-2}R_k \qquad \text{②より} \\
&= -\mu_{k-1}{}^tU_{k-2}(R_{k-1} - \lambda_{k-1}AU_{k-1}) \\
&= 0 \quad \text{第１項は①より，} \\
&\qquad\qquad \text{２項目は共役条件よりゼロ}
\end{aligned}
$$

これより、

$$
\mu_k = \frac{{}^tR_kR_k}{{}^tR_{k-1}R_{k-1}}
$$

アルゴリズムをまとめると、

適当な初期ベクトル $x^{(0)}$ を選び　　例えば

$R_0 = b - Ax^{(0)}, \quad U_0 = R_0$ とする

$$x^{(0)} = 0,$$

$$U_0 = R_0 = b$$

$$\lambda_k = \frac{{}^tU_k R_k}{{}^tU_k A U_k}$$

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

$$R^{(k+1)} = R^{(k)} - \lambda_k A U_k$$

$\left\| R^{(k+1)} \right\| \le \varepsilon \|b\|$ ならば終了

$$\mu_k = \frac{{}^tR_k R_k}{{}^tR_{k-1} R_{k-1}}$$

$$U_k = R_k + \mu_k U_{k-1}$$

$k = 0, 1, 2, \cdots$
について繰り返す

ε :解の精度に応じて
適当に定める

次式が成り立つ　$^tU_iAU_k = 0 \quad (i = 0,1,\cdots,k-2,k-1)$

全ての U_k は線形独立

更に次式が成り立つ　$^tR_iR_j = 0 \quad (i \neq j)$

$R_0, R_1, R_2, \cdots$ は互いに直交

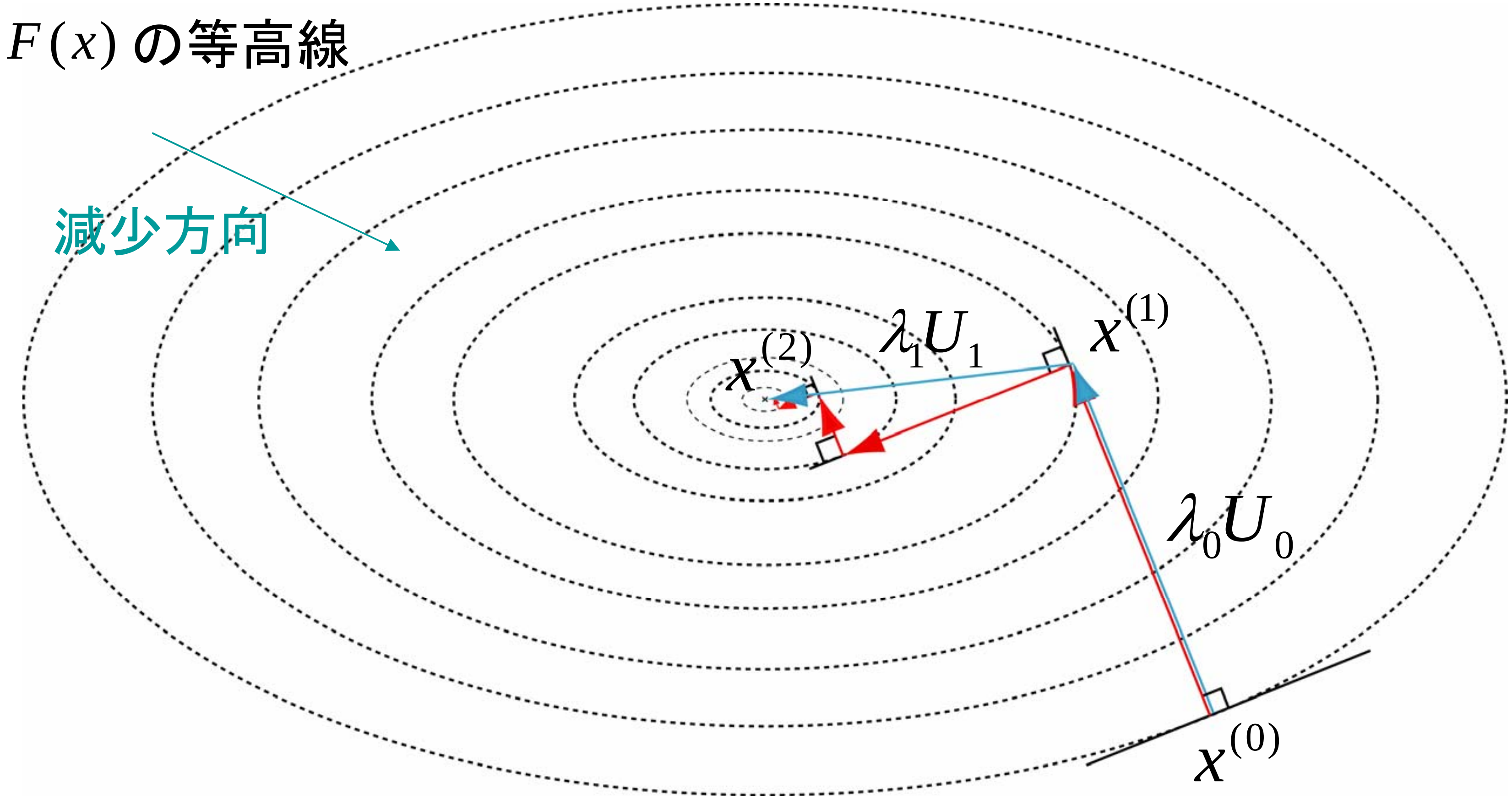
$R_j = {}^t\left(R_{1j}, R_{2j}, \cdots, R_{Nj}\right)$ ： N 次元ベクトル

直交するベクトルは N 個以下

$R_N = b - Ax^{(N)} = 0 \longrightarrow$ N 回以下の反復で解に収束

しかし，現実の計算ではまるめ誤差によりN回以上の反復となる場合が多い

$U_k = R_k + \mu_k U_{k-1}$ とした場合（共役勾配法）



（２次元では）2回の反復で解に辿り着く