２００5年５月25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 → 演習

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

# ３．６　共役勾配法

仮定１　$A = {}^t A$　　対称行列

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

$$Ax = b$$

もし、$A$ が仮定を満たさなければ

$$ {}^t A A x = {}^t A b $$

を考えればよい。

$Ax = b$ の解 $\xi$ 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、

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

「まず探索“キョリ” λ について」

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

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。

$$R_k = b - A x^{(k)}$$

$F(x^{(k+1)})$ を最小にする $\lambda_k$ は

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

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

【証明】

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

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

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

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

$$ = 0 $$

適当な $x^{(0)}$ から出発し、順次修正を加える

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

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

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

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

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

「次に探索方向Uについて」

$U_k$ として何が適当か？

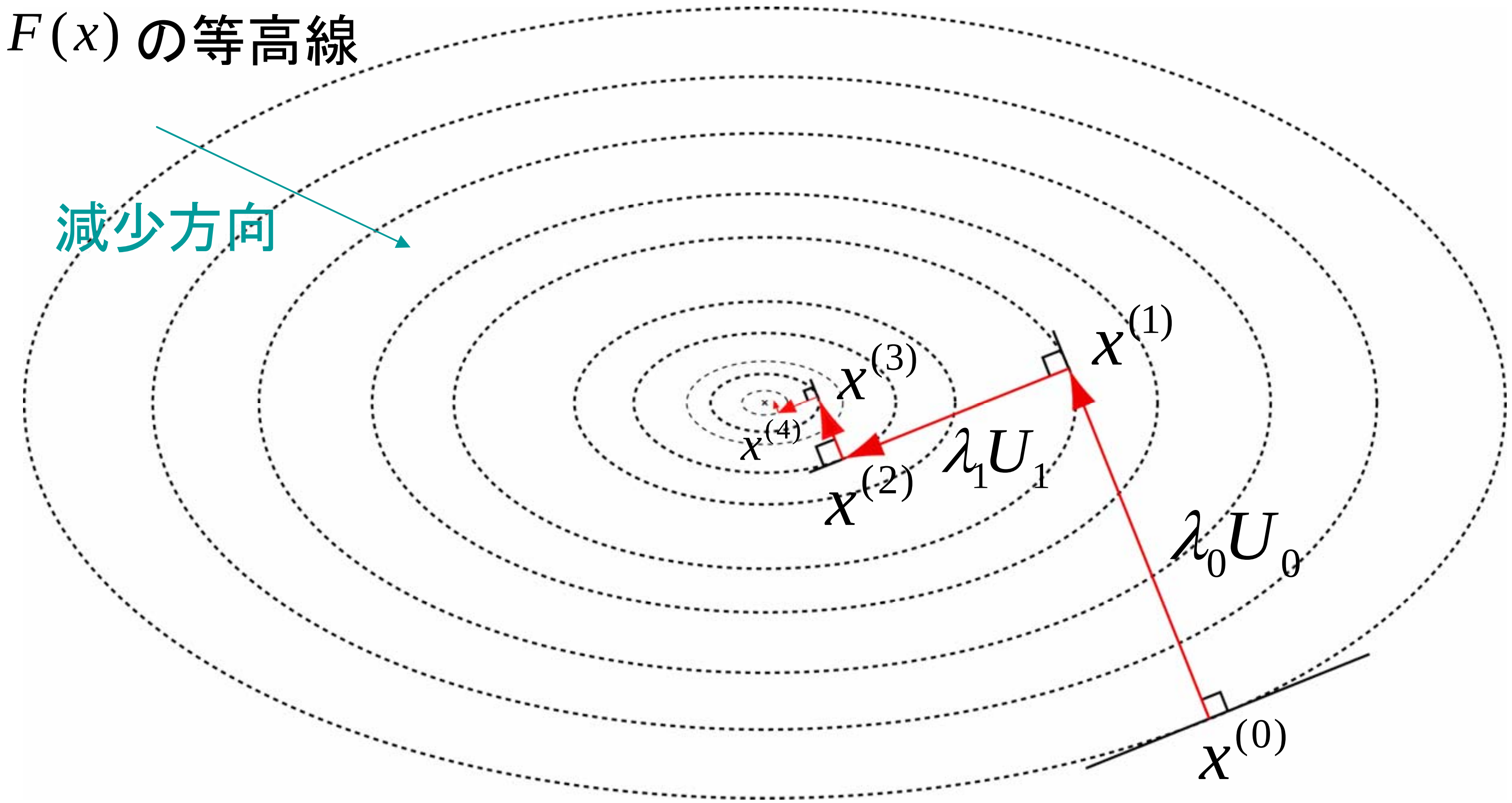
ひとつの（もっともらしい）方法は,

$U_k = R_k = b - Ax^{(k)}$（残差）とすること.

$R_k$ : 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

「共役勾配法のミソ」

$U_k = R_k$ を少し変更して

$U_k = R_k + \mu_k U_{k-1}$ とする

$\mu_k$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・・ $\boxed{R_{k+1} = R_k - \lambda_k AU_k}$ 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・・

$$R_{k+1} = R_k - \lambda_k AU_k \quad \cdots②$$

$U_k$ を次の反復式で決める。

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

$\mu_k$ を決めるために、共役関係

$${}^t U_{k-1} A U_k = 0$$

を課す。この関係より、

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

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

②により

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

これより、

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

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

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

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

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

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

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

例えば

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

$U_0 = R_0 = b$

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

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

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

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

$\varepsilon$ :解の精度に応じて適当に定める

次式が成り立つ　$^{t}U_i A U_k = 0 \quad (i = 0, 1, \cdots, k-2, k-1)$

全ての　$U_k$　は線形独立

更に次式が成り立つ　$^{t}R_i R_j = 0 \quad (i \neq j)$

$R_0, R_1, R_2, \cdots$ は互いに直交

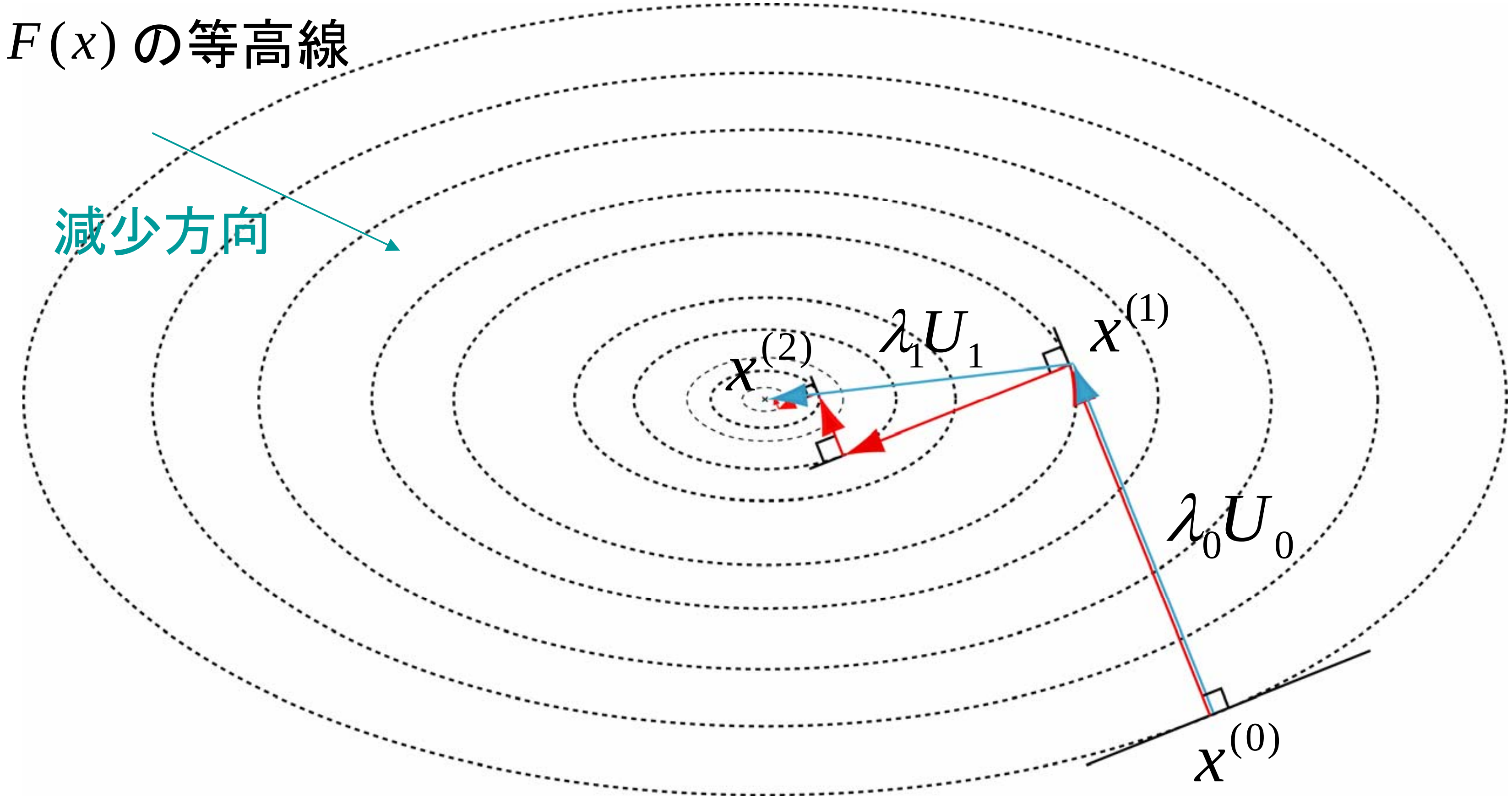
$R_j = {}^{t}\left(R_{1j}, R_{2j}, \cdots, R_{Nj}\right)$ ：$N$ 次元ベクトル

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（<u>共役勾配法</u>）




（２次元では）2回の反復で解に辿り着く