２０２３年前期　数値解析　第 10 回講義ノート

２０２３年６月２２日　三浦憲二郎

スライド１　講義アウトライン

- 連立方程式の反復解法
    - 前回の復習
    - 「　　　　　　　　　　　」法

スライド２　連立１次方程式　p.93

- 行列のほとんどの要素が 0

$$Ax = b$$

　　　「　　　」行列　　sparse matrix

- 逆にそのほとんどが 0 でない

　　　「　　　」行列　　dense matrix

- 疎行列を効率よく解く方法

　　　「　　　」解法

スライド３　反復法の原理

連立１次方程式

$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$　(5.1)

を同値な方程式

$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{Mx}+\boldsymbol{Nb}$

に変形し，「　　　」法により解を求める．$\boldsymbol{M}$を「　　　」行列という．

「　　　」写像の原理

スライド４ 縮小写像の原理　定理 5.1　p.94

$\boldsymbol{R}^n$　上で定義された関数$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$ が

(1) $\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n\rightarrow\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})\in\boldsymbol{R}^n$

(2) $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{R}$^$\boldsymbol{n}\rightarrow||\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})||\leq\boldsymbol{L}||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}||\in\boldsymbol{R}$^$\boldsymbol{n}$

(3) $\boldsymbol{0}\leq\boldsymbol{L}<\boldsymbol{1}$

を満たすとき，方程式

$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$

の解$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\alpha}$は$\boldsymbol{R}^n$においてただ１つ存在する．そして，$\boldsymbol{x}^{(0)}$ を「　　　」とする反復に

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

によって，生成される列〚{$\boldsymbol{x}$〛^(($\boldsymbol{k}$))}は$\boldsymbol{k}\rightarrow\infty$のとき$\boldsymbol{\alpha}$に「　　　」する．

スライド５　縮小写像の原理　定理 5.2　p.94

あるノルム||・||について|(|**M**|)|<**1**ならば反復法

𝒙^((𝒌+𝟏))=𝝓(𝒙^((𝒌)))=𝑴𝒙^((𝒌))+𝑵𝒃

によって作られる列〖{**𝒙**〗^((**𝒌**))}は(5.1)の解**𝒙**に収束する

(証明)

任意の**𝒙**, **𝒚**∈**𝑹^𝒏**に対して,

|(|**𝝓**(**𝒙**)−**𝝓**(**𝒚**)|)|=|(|**𝑴𝒙**−**𝑴𝒚**|)|≤|(|**𝑴**|)|·||**𝒙**−**𝒚**||(≤||**𝒙**−**𝒚**|)|

が成り立つので，**𝝓**(**𝒙**)は定理 5.1 の仮定を満たす．よって，〖{**𝒙**〗^((**𝒌**))}は解**𝒙**に収束する．

スライド６ 行列 A の分解

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}$$

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a_{11}} & \cdots & \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ & \cdots & \boldsymbol{a_{nn}} \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{0} & \cdots & \boldsymbol{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{a_{n1}} & \cdots & \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{0} & \cdots & \boldsymbol{a_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{0} & \cdots & \boldsymbol{0} \end{bmatrix}$$

スライド７　ヤコビ法　p.95

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} &= \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) \\ &= \boldsymbol{Mx} + \boldsymbol{Nb} \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{M} = -\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}),\ \boldsymbol{N} = \boldsymbol{D}^{-1}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= \boldsymbol{N}^{-1}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{M}) \\ &= \boldsymbol{D}(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})) \\ &= \boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U} \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{-1}\{\boldsymbol{b} - (L + U)\boldsymbol{x}^{(k)}\}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= \boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U} \\ \boldsymbol{D} &= \begin{bmatrix} a_0 0 & & \\ & \ddots & \\ & & a_{n-1,n-1} \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{L} &= \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_1 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,0} & \cdots & a_{n-1,n-2} & 0 \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{U} &= \begin{bmatrix} 0 & a_0 1 & \cdots & a_{0,n-1} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & a_{n-2,n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

スライド９　ガウス・ザイデル法　 p.100

$$\boldsymbol{M} = -(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U},\ \boldsymbol{N} = (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= \boldsymbol{N}^{-1}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{M}) \\ &= (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})(\boldsymbol{I} - (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{LU})^{-1} \\ &= \boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U} \end{aligned}$$

反復法　$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{-1}\{\boldsymbol{b} - (L + U)\boldsymbol{x}^{(k)}\}$

反復回数　34 回

スライド８　共役勾配法　p.109

正定値行列とその性質

共役勾配法は「　　　　　　　」分解と同様，対称正定値(symmetric positive definite)行列の場合に有効

n 次元正方行列 A が x≠0 である任意のベクトル x に対して n 次元の内積

$$(x, Ax) > 0$$

p.68, 定理 3.9　A を任意のベクトル x (x≠0)に対して Ax≠0 となるような n 次正方行列とする．このとき，B=A^tA は対称正定値行列である．

$\boldsymbol{Ax = b}$　の代わりに　$\boldsymbol{A^t Ax = A^t b}$　を解く．

スライド９　共役勾配法　p.109

定理 5.7　A は　n 次「　　　　　　　　」行列とする．　このとき，

連立１次方程式　A x =b　の解　x　は関数

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{Ax}) - (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b})$$

を最小にする．

（証明）　任意のベクトル h (h≠0)に対して

$$\begin{aligned} f(\tilde{x}) &= \frac{1}{2}(\tilde{x} + \boldsymbol{h}, A(\tilde{x} + \boldsymbol{h})) - (\tilde{x} + \boldsymbol{h}, \boldsymbol{b}) \\ &= \frac{1}{2}\{(\tilde{x}, A\tilde{x}) + (\tilde{x}, A\boldsymbol{h}) + (\boldsymbol{h}, A\tilde{x}) + (\boldsymbol{h}, A\boldsymbol{h})\} - (\tilde{x}, \boldsymbol{b}) - (\boldsymbol{h}, \boldsymbol{b}) \\ &= f(\tilde{x}) + \frac{1}{2}\{(\tilde{x}, A\boldsymbol{h}) + (\boldsymbol{h}, A\tilde{x}) + (\boldsymbol{h}, A\boldsymbol{h})\} - (\boldsymbol{h}, \boldsymbol{b}) \end{aligned}$$

A は対称なので

$$(\tilde{x}, A\boldsymbol{h}) = \tilde{x}^t A\boldsymbol{h} = \tilde{x}^t A^t \boldsymbol{h} = (A\tilde{x})^t \boldsymbol{h} = (A\tilde{x}, \boldsymbol{h}) = (\boldsymbol{h}, A\tilde{x})$$

スライド１０　共役勾配法　p.109

$$\begin{aligned} f(\tilde{x}) &= f(\tilde{x}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{h}, A\boldsymbol{h}) + (\boldsymbol{h}, A\tilde{x}) - (\boldsymbol{h}, \boldsymbol{b}) \\ &= f(\tilde{x}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{h}, A\boldsymbol{h}) + (\boldsymbol{h}, A\tilde{x} - \boldsymbol{b}) \\ &= f(\tilde{x}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{h}, A\boldsymbol{h}) \end{aligned}$$

A は正定値なので，（h, Ah）＞0 で　$f(\tilde{x} + \boldsymbol{h}) - f(\tilde{x}) > 0, \quad \text{Hence } f(\tilde{x} + \boldsymbol{h}) > f(\tilde{x})$

スライド１１　共役勾配法　　p.109

共役の定義

ベクトル　p_i　とベクトル　p_j　が（p_i,Ap_j）=0, i≠j を満たすとき ベクトル　p_i　と　p_j　は行列Aに関して「　　　」である，あるい はAに関して「　　　　」するという．

A を n 次対称正定値行列とする．連立１次方程式 Ax=b の解　→　f (x)を最小にする x を求める．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_{n+1} &= \boldsymbol{x} + \alpha_k \boldsymbol{p}_k \\
f(\boldsymbol{x}_{k+1}) &= f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k) \\
&= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} + \alpha_k \boldsymbol{p}_k, A(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k)) - (\boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{b}) \\
&= f(\boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}\alpha_k^2 (\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k) - \alpha(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k) \quad \text{where } \boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k \\
&= \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)\{\alpha_k^2 - 2\frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}\alpha_k\} + f(\boldsymbol{x}_k) \\
&= \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)\{\alpha_k - \frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}\}^2 + f(\boldsymbol{x}_k) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)\frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)^2}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)^2}
\end{aligned}
$$

スライド１１　共役勾配法（conjugate gradient：ＣＧ法）　p.109

したがって

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$$

で　$f(x_{k+1})$は最小.　残差 r_{k+1}

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{b} - A(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k) = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k$$

探索方向 p_{k+1}　，ただし $p_0 = r_0$ とする．

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$$

β_kは p_{k+1} と p_k が共役になるように定める．

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{p}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k) &= 0 \\
(\boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k) &= 0 \\
\text{Hence } \beta_k &= -\frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}
\end{aligned}
$$

スライド１２　公約勾配法　　p.114

定理 5.8　共役勾配法によって計算される残差ベクトル r_k および 方向ベクトル p_k に対して，$i \neq j$ のとき次が成り立つ．

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) &= 0 \qquad (1) \\
(\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_j) &= 0 \qquad (2)
\end{aligned}
$$

（証明）

1) k=1

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p}_0 &= \boldsymbol{r}_0 \\
\boldsymbol{r}_1 &= \boldsymbol{r}_0 - \alpha_0 A\boldsymbol{p}_0 \\
(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_0) = (\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1) &= (\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0) - \alpha_0(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{p}_0)
\end{aligned}
$$

β_0の決め方より $(\boldsymbol{p}_1, A\boldsymbol{p}_0) = 0$

A が対称なので $(\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_1) = (A\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1) = (\boldsymbol{p}_1, A\boldsymbol{p}_0) = 0$

スライド１３　共役勾配法　 p.114

（証明）

2) k>=1 で成り立つと仮定

3)　式(1)　 a)　i<k

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_i) &= (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{k+1}) \\
&= (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k) \\
&= -\alpha_k(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_k) \\
&= -\alpha_k(\boldsymbol{p}_i - \beta_{i-1}\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_k) = 0
\end{aligned}
$$

b) i=k

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}_{k+1},\boldsymbol{r}_k) &= (\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_k)-\alpha_k(\boldsymbol{r}_k,A\boldsymbol{p}_k)\\ &= (\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_k)-\alpha_k(\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_k)\\ &= (\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{r}_k)-(\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{r}_k)\\ &= -\beta_{k-1}(\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{r}_k)\\ &= -\beta_{k-1}(\boldsymbol{p}_{k-1},\boldsymbol{r}_{k-1}-\alpha_{k-1}A\boldsymbol{p}_{k-1}\\ &= -\beta_{k-1}\{(\boldsymbol{p}_{k-1},\boldsymbol{r}_{k-1})-\alpha_{k-1}(\boldsymbol{p}_{k-1},A\boldsymbol{p}_{k-1})\}=0\end{aligned}$$

スライド１４　共役勾配法　 p.114

（証明）

4)　式(2)　 a)　i<k

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}_{k+1},A\boldsymbol{p}_i) &= (\boldsymbol{r}_{k+1}+\beta_k\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_i)\\ &= (\boldsymbol{r}_{k+1},A\boldsymbol{p}_i)\\ &= \frac{1}{\alpha_i}(\boldsymbol{r}_{k+1},\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_{i+1})=0\end{aligned}$$

b) i=k

$$(\boldsymbol{p}_{k+1},A\boldsymbol{p}_k)=(\boldsymbol{r}_{k+1},A\boldsymbol{p}_k)+\beta_k(\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_k)=0$$

実は

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{p}_j) &= 0\\ (\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{p}_i) &= |\boldsymbol{r}_j|^2\end{aligned}$$

スライド１５　共役勾配法　 p.115

定理 5.9　A は正則な n 次対称正定値行列で，b は n 次元ベクトルとする．このとき，共役勾配法の反復を n 回実行すると Ax=b の解が得られる．

（証明）

n 個のベクトル　r_0,　r_1,…,　r_{n-1} は互いに直交しているので,

これらすべてに直交するベクトル　r_n　は 0 ベクトルとなる．

したがって，　$r_n = b - A x = 0$,　 A が正則ならば,

$$\boldsymbol{x}_n=\boldsymbol{x}$$

スライド１６　共役勾配法：プログラムその１

```
/* 1 ノルムの計算 */
double vector_norm1(double* a, int m, int n)
{
        int i;
        double norm = 0.0;
        for (i = m; i <= n; i++){
                norm += fabs(a[i]);
        }
        return norm;
}
/* A ベクトル a[m...n]と b[m...n]の内積を計算する */
double inner_product(int m, int n, double* a, double* b)
{
```

```
	int i;
	double s = 0.0;
	for (i = m; i <= n; i++) s += a[i] * b[i];
	return s;
}
/* 行列 a[1...N][1...]とベクトル b[1...N]との積 c <- Ab */
void matrix_vector_product(double** a, double* b, double* c)
{
	double wk;
	int i, j;
	for (i = 1; i <= N; i++){
		wk = 0.0;
		for (j = 1; j <= N; j++){   wk += a[i][j] * b[j]; }
		c[i] = wk;
	}
}
```

スライド１６　共役勾配法：プログラムその１

```
/* 共役勾配法 */
double* cg(double** a, double* b, double* x)
{
	double eps, * r, * p, * tmp, alpha, beta, work;
	int i, k = 0;
	r = dvector(1, N); /* r[l...N] */
	p = dvector(1, N); /* p[l...N] */
	tmp = dvector(1, N); /* tmp[l...N] */
	matrix_vector_product(a, x, tmp); /* tmp <- A b */
	for( i = 1; i <= N; i++){
		p[i] = b[i] - tmp[i]; r[i] = p[i];
	}
	do{	/* alpha の計算 */
		matrix_vector_product(a, p, tmp); /* tmp <- A p_k */
		work = inner_product(1, N, p, tmp); /* work <- (p,Ap_k)*/
		alpha = inner_product(1, N, p, r) / work;
		/* x_{k+l} と r_{k+l}の計算 */
		for (i = 1; i <= N; i++) x[i] = x[i] + alpha * p[i];
		for (i = 1; i <= N; i++) r[i] = r[i] - alpha * tmp[i];
		/* 収束判定 */
		eps = vector_norm1(r, 1, N);
		k++; /* 反復回数の更新 */
		if (eps < EPS) goto OUTPUT;
		/* beta と p_{k+l}の計算 */
		beta = -inner_product(1, N, r, tmp) / work;
		for (i = 1; i <= N; i++) p[i] = r[i] + beta * p[i];
	}while (k < KMAX);
OUTPUT:;
	/* 領域の解放 */
	free_dvector(r, 1); free_dvector(p, 1); free_dvector(tmp, 1);
	if (k == KMAX){
		printf("答えが見つかりませんでした¥n");
		exit(1);
	}
	else	{
		printf("反復回数は%d です¥n", k); /* 反復回数を画面に表示 */
		return x;
	}
} /* 反復回数　10 回 */
```