情報数学C

Mathematics for Informatics C

第3回線形連立方程式の反復解法 (ヤコビ法,ガウス・ザイデル法,SOR法,共役勾配法)

> 情報メディア創成学類 藤澤誠

情報数学C (GC21601)

今回の講義内容

- 今日の問題
- ヤコビ法とガウス・ザイデル法
- SOR法
- 共役勾配法
- 前処理付き共役勾配法

情報数学C (GC21601

今回の講義で扱う問題

Ax = b

情報数学C (GC21601

今回の講義で扱う問題

前回と同じ**線形システム** $Aoldsymbol{x} = oldsymbol{b}$

- 前回とは解き方が異なる ⇒ **反復法**
- 前回の解き方の復習 (直接解法)
 - ガウスの消去法
 - 三角分解

線形システムを直接解いているので 打ち切り誤差はない(丸め誤差はありうる)

情報数学C (GC21601

直接解法の計算時間

直接解法の計算時間は?

n	$o(n^2)$ の理論的な計算時間	$oldsymbol{o}(n^3)$ の理論的な計算時間
10	1×10 ⁻¹⁰ 秒	1×10 ⁻⁹ 秒
10^{2}	1×10 ⁻⁸ 秒	1×10 ⁻⁶ 秒
10^{3}	1×10 ⁻⁶ 秒	1×10 ⁻³ 秒
10^{4}	1×10 ⁻⁴ 秒	1秒
10^{5}	0.01秒	1000秒
10 ⁶	1秒	106秒=約278時間
107	100秒	108秒=約31.7年

ガウスの消去法が $O(n^3)$, 三角分解で $O(n^2)$

反復解法とは?

*A*が変わらなければ三角分解でいいけど, そのような問題ばかりではない.

 \Rightarrow **前計算なし**で $O(n^2)$ ぐらいにできないか?



反復解法

今回勉強するガウス・ザイデル法で $O(kn^2)$ (kは1以上の整数)

[≜]C (GC21601)

6

反復解法とは?

反復解法の特徴

- 反復処理で初期値から徐々に解に近づけて
- 直接解法と異なり、厳密な解ではない* (打ち切り誤差が発生するため)
- 計算コストはO(kn²)以下
 - ⇒ 反復回数 $k \ll n$ なら直接解法より 高速に解ける.

*直接解法も丸め誤差/桁落ち誤差が生じるがアルゴリズム(数式)上は誤差なし7

今回の講義内容

- 今日の問題
- ヤコビ法とガウス・ザイデル法
- SOR法
- 共役勾配法
- 前処理付き共役勾配法

表記法の復習

線形システムAx = bの表記法の復習

C言語のコードとの対応をとるために

- インデックス0スタート $(a_{11} \sim a_{nn} \Rightarrow a_{0,0} \sim a_{n-1,n-1})$
- 右辺項をn列目として表記 $(b_1 \sim b_n \Rightarrow a_{0,n} \sim a_{n-1,n})$

$$\begin{pmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & a_{0,2} & & a_{0,n-1} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,n-1} \\ a_{2,0} & a_{2,1} & a_{2,2} & & a_{2,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \dots & a_{n-1,n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{0,n} \\ a_{1,n} \\ a_{2,n} \\ \vdots \\ a_{n-1,n} \end{pmatrix}$$

右辺までまとめて $n \times (n+1)$ の行列にしたものを拡大行列という

$$\begin{pmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & a_{0,2} & a_{0,n-1} & a_{0,n} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ a_{2,0} & a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,n-1} & a_{2,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \dots & a_{n-1,n-1}a_{n-1,n} \end{pmatrix}$$

ヤコビ法

線形システムの反復解法で最も基本的なもの がヤコビ法

• 3元連立方程式で考えてみよう

$$\begin{cases} a_{00}x_0 + a_{01}x_1 + a_{02}x_2 = b_0 \\ a_{10}x_0 + a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{20}x_0 + a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases}$$

1つ目の式を x_0 について解くと:

$$x_0 = \frac{b_0 - a_{01}x_1 - a_{02}x_2}{a_{00}}$$
 x_1, x_2 が分かっていないのだから当然

解けないんだけど・

ヤコビ法

 x_1, x_2 についての式も求めて, x_i に**何らかの初期値** $x_i^{(0)}$ を与えたとすると...

$$x_0^{(1)} = \frac{b_0 - a_{01}x_1^{(0)} - a_{02}x_2^{(0)}}{a_{00}}$$

$$x_1^{(1)} = \frac{b_1 - a_{10}x_0^{(0)} - a_{12}x_2^{(0)}}{a_{11}}$$

$$x_2^{(1)} = \frac{b_2 - a_{20}x_0^{(0)} - a_{21}x_1^{(0)}}{a_{22}}$$

 $x_i^{(0)}$ から $x_i^{(1)}$ を計算 \Rightarrow もしこの計算で $x_i^{(1)}$ が $x_i^{(0)}$ より解に近づ いているならば、この計算を繰り返せばいつか解に収束する

ヤコビ法

k番目の繰り返しにおける値を $x_i^{(k)}$ とすると:

$$\begin{split} x_0^{(k+1)} &= \frac{b_0 - a_{01} x_1^{(k)} - a_{02} x_2^{(k)}}{a_{00}} \\ x_1^{(k+1)} &= \frac{b_1 - a_{10} x_0^{(k)} - a_{12} x_2^{(k)}}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{b_2 - a_{20} x_0^{(k)} - a_{21} x_1^{(k)}}{a_{22}} \end{split}$$

この計算を $\left|x_i^{(k)}-x_i^{(k+1)}
ight|<arepsilon$ となるまで反復

ヤコビ法

収束するまでの反復数をKとすると 計算量は $O(Kn^2)$

ヤコビ法

 $n \times n$ の線形システムについてのヤコビ法

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=0 \sim n-1, j \neq i} a_{i,j} x_j^{(k)} \right) \qquad (i = 0, 1, \dots, n-1)$$

計算手順

- 1. 初期値 $x_i^{(0)}$ を設定 $(i = 0 \sim n 1)$
- 2. 以下の処理を反復(k = 0,1,...)
 - a. 上の式により, $i = 0 \sim n 1$ について $x_i^{(k+1)}$ を計算
 - b. $\left|x_i^{(k)} x_i^{(k+1)}\right| < \varepsilon$ となったら反復終了

情報数学C (GC21601)

```
ヤコビ法のコード例
配列yに\chi^{(k+1)},配列\chi^{(k)}を格納

int k;
for(k=0; k<\max_{j=0}^{k} (j=0) j<\infty_{j=0}^{k} (j>0) j>0 (j
```

ヤコビ法

ヤコビ法の実行結果例1

$$\begin{pmatrix} 8 & 1 & 3 \\ 1 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 9 \\ -2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{tx} \to \text{ff} \text{M}} \underbrace{\begin{array}{c} 8 & 1 & 3 & 7 \\ 1 & 5 & 2 & 9 \\ 3 & 1 & 7 & -2 \end{pmatrix}}_{\text{MI}}$$

$$\text{PR} \left(x_0, x_1, x_2 \right) = (1, 2, -1)$$

- 初期値として $\left(x_0^{(0)}, x_1^{(0)}, x_2^{(0)}\right) = (0, 0, 0)$ を設定
- ・ 収束判定には絶対誤差を使用 $\left|x_i^{(k+1)} x_i^{(k)}\right| \leq \varepsilon$
- $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$ を設定

情報数学C (GC21601

ヤコビ法 $\begin{pmatrix} 1 & 5 & 2 & 9 \\ 3 & 1 & 7 & -2 \end{pmatrix}$ ヤコビ法の実行結果例1 解) $(x_0, x_1, x_2) = (1, 2, -1)$ 最初の方は 1 : x0 = 0.875, x1 = 1.8,x2 = -0.285714変化が大きい 2 : x0 = 0.757143, x1 = 1.73929, x2 = -0.917857けど徐々に変 : x0 = 1.00179, x1 = 2.01571, x2 = -0.858673化が小さく : x0 = 0.945038, x1 = 1.94311, x2 = -1.00301Ų 5 : x0 = 1.00824, x1 = 2.0122, x2 = -0.968318 6 : x0 = 0.986595, x1 = 1.98568, x2 = -1.00527 : x0 = 1.00377, x1 = 2.00479, x2 = -0.99220922 : x0 = 0.999999, x1 = 2, 23 : x0 = 1, x1 = 2, 反復24回目で許容誤差内の解に収束 ⇒ 必ず収束するのか?

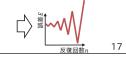
ヤコビ法

ヤコビ法の実行結果例2

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \\ 3 & 4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix} \qquad \text{PM} \quad (x_0, x_1, x_2) = (1, -2, 3)$$

98 : x0 =-1.33e+24, x1 =-7.49e+23, x2 =-1.32e+24 99 : x0 = 2.35e+24, x1 = 1.32e+24, x2 = 2.33e+24

反復で解の値がどんどん大きくなって いき収束しない⇒解の**発散**



15

ヤコビ法の収束条件

ヤコビ法で収束するための条件は?

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=0 \sim n-1, j \neq i} a_{i,j} x_j^{(k)} \right) \qquad (i = 0, 1, \dots, n-1)$$

行列 $A = \{a_{i,j}\}$ をD + L + Uと分解してみる

$$D = \begin{pmatrix} a_{0,0} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{1,1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a \end{pmatrix} \qquad \qquad \Box \Rightarrow \qquad a_{i,i} \quad (i = j)$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{1,0} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,1} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 0 & a_{0,1} & \cdots & a_{0,n-1} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{1,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \not \Box \qquad (i \neq j)$$

青報数学C (GC21601)

情報数学C (GC2160

ヤコビ法の収束条件

ヤコビ法の更新式を行列表記してみる

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=0 \sim n-1, j \neq i} a_{i,j} x_j^{(k)} \right)$$
 $(i = 0,1, ..., n-1)$ ベクトルと行列を用いた表記 $\mathbf{x}^{(k+1)} = D^{-1}(\mathbf{b} - (L+U)\mathbf{x}^{(k)})$ $H = -D^{-1}(L+U), \mathbf{z} = D^{-1}\mathbf{b}$ と置く $\mathbf{x}^{(k+1)} = H\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{z}$ +分な数(K 回)反復して収束したとすると: $\mathbf{x}^{(K)} = H\mathbf{x}^{(K)} + \mathbf{z}$ 2つの式から以下が導出できる

$$x^{(K)} - x^{(k+1)} = H(x^{(K)} - x^{(k)})$$

ヤコビ法の収束条件

ヤコビ法で**収束するための条件**は?

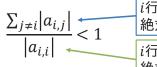
反復する毎に誤差が小さくなれば収束するのだから 条件は:

$$\|H\| < 1 \qquad \text{ZZT} H = -D^{-1}(L+U)$$

$$\frac{\sum_{j\neq i} \left|a_{i,j}\right|}{\left|a_{i,i}\right|} < 1 \qquad (i = 0,1,...,n-1)$$

* ||H||は<u>行列のノルム</u> 20

ヤコビ法の収束条件



i行目の非対角成分の 絶対値の和

i行目の**対角成分**の

ヤコビ法で収束するための十分条件*

係数行列Aの各行において**対角要素の絶対値** が非対角要素の絶対値の和より大きい**

$$|a_{i,i}| > \sum_{i \neq i} |a_{i,j}|$$
 対角優位

*必要十分条件ではない、対角優位でなくても収束することはある。
**対角優位な行列の最大固有値の絶対値(スペクトル半径)は1より小さくなるのでこれを条件とする場合もある・21

ヤコビ法の収束条件

ヤコビ法の2つの例を比べてみよう

$$\begin{pmatrix} 8 & 1 & 3 \\ 1 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 9 \\ -2 \end{pmatrix}$$
1行目: $|a_{i,i}| = 8$, $\sum_{j \neq i} |a_{i,j}| = 4 $\Rightarrow \bigcirc$ 2行目: $|a_{i,i}| = 5$, $\sum_{j \neq i} |a_{i,j}| = 3 $\Rightarrow \bigcirc$ 3行目: $|a_{i,i}| = 7$, $\sum_{j \neq i} |a_{i,j}| = 4 $\Rightarrow \bigcirc$ **収束する**

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \\ 3 & 4 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$$
1行目: $|a_{i,i}| = 2$, $\sum_{j \neq i} |a_{i,j}| = 4 $\Rightarrow \times$ 2行目: $|a_{i,i}| = 3$, $\sum_{j \neq i} |a_{i,j}| = 3 $\Rightarrow \triangle$ 3行目: $|a_{i,i}| = 3$, $\sum_{j \neq i} |a_{i,j}| = 7 $\Rightarrow \times$ 対角優位でなかったらどうするのか? \Rightarrow 並び替えで対角優位化(MC64オーダリング*など)$$$$$$

ガウス・ザイデル法

ヤコビ法の収束性を向上させるにはどうすれ ば良いか?

三元連立方程式の場合の式をもう一度見てみよう!

$$x_0^{(k+1)} = \frac{b_0 - a_{01}x_1^{(k)} - a_{02}x_2^{(k)}}{a_{00}}$$

$$x_1^{(k+1)} = \frac{b_1 - a_{10}x_0^{(k)} - a_{12}x_2^{(k)}}{a_{11}}$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{b_2 - a_{20}x_0^{(k)} - a_{21}x_1^{(k)}}{a_{22}}$$

上から順番に計算してるな ら,赤字で示した

 $x_0^{(k)}, x_1^{(k)}, x_2^{(k)}$ はすでに新しい値 $(x^{(k+1)})$ が計算済みでは?

ガウス・ザイデル法

計算済みの(k+1)ステップでの値があるのならそれ を使えば収束は早くなるのでは?

$$\begin{split} x_0^{(k+1)} &= \frac{b_0 - a_{01} x_1^{(k)} - a_{02} x_2^{(k)}}{a_{00}} \\ x_1^{(k+1)} &= \frac{b_1 - a_{10} x_0^{(k+1)} - a_{12} x_2^{(k)}}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{b_2 - a_{20} x_0^{(k+1)} - a_{21} x_1^{(k+1)}}{a_{22}} \end{split}$$

ガウス・ ザイデル法

 $x^{(k+1)}$ に掛かっている係数(青字)はすべてi > i(i = 0から順番に計算しているので) ⇒ 左下非対角成分

ガウス・ザイデル法

 $n \times n$ の線形システムについてのガウス・ザイデル法

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=0 \sim i-1} a_{i,j} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1 \sim n-1} a_{i,j} x_j^{(k)} \right)$$
 \downarrow 行列表記 $(i = 0,1, ..., n-1)$ $x^{(k+1)} = D^{-1} (\boldsymbol{b} - L \boldsymbol{x}^{(k+1)} - U \boldsymbol{x}^{(k)})$

計算手順(ヤコビ法と同じ)

- 1. 初期値 $x_i^{(0)}$ を設定 $(i=0 \sim n-1)$
- 2. 以下の処理を反復(k回目の反復)
 - a. 上の式により, $i=0\sim n-1$ について $x_i^{(k+1)}$ を計算
 - b. $\left|x_i^{(k)} x_i^{(k+1)}\right| < \varepsilon$ となったら反復終了

情報数学C (GC21601

25

```
ガウス・ザイデル法
ガウス・ザイデル法のコード例
int k;// 計算反復回数
                                   or Login Light
for(k = 0; k < max_iter; ++k){
    int 1 = 0;
    for(int i = 0; i < n; ++i){
       double tmp = x[i];
x[i] = A[i][n];
       for(int j = 0; j < n; ++j){
    x[i] -= (j != i ? A[i][j]*x[j] : 0.0);
                                                x^{(k+1)}とx^{(k)}を同じ配列に
                                                格納することで計算済み
       x[i] /= A[i][i];
                                                の値を使うことができる
                                                (ヤコビ法と違うところ)
       if(fabs(tmp-x[i]) > eps) l++;
                     ―― 相対誤差を使う場合は,
                          fabs(tmp-x[i])/tmp > eps;
    ; f(1 == 0) break; // すべての解が許容誤差以下なら反復終了
```

ガウス・ザイデル法

ガウス・ザイデル法の実行結果例

- 初期値として $\left(x_0^{(0)}, x_1^{(0)}, x_2^{(0)}\right) = (0, 0, 0)$ を設定
- 収束判定には絶対誤差を使用 $\left|x_i^{(k+1)}-x_i^{(k)}\right| \leq \varepsilon$
- $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$ を設定
- 対角優位 (**収束条件はヤコビ法と同じ**)

.....

ガウス・ザイデル法

ガウス・ザイデル法の実行結果例

 $\begin{pmatrix} 8 & 1 & 3 & 7 \\ 1 & 5 & 2 & 9 \\ 3 & 1 & 7 & -2 \end{pmatrix}$

解) $(x_0, x_1, x_2) = (1, 2, -1)$

```
0: x0 = 0.875, x1 = 1.625, x2 = -0.892857

1: x0 = 1.0067, x1 = 1.9558, x2 = -0.996556

2: x0 = 1.00423, x1 = 1.99778, x2 = -1.0015

3: x0 = 1.00084, x1 = 2.00043, x2 = -1.00042

4: x0 = 1.0001, x1 = 2.00015, x2 = -1.00007

5: x0 = 1.00001, x1 = 2.00003, x2 = -1.00001

6: x0 = 0.999999, x1 = 2, x2 = -1

7: x0 = 1, x1 = 2, x2 = -1

8: x0 = 1, x1 = 2, x2 = -1
```

反復9回目で許容誤差内の解に収束(ヤコビ法だと24回)

⇒ ヤコビ法の半分以下の反復で収束

情報数学C (GC21601)

ガウス・ザイデル法

収束が早いのなら**ガウス・ザイデル法だけ**でいいのでは?

⇒ 最近10年ぐらいは

ヤコビ法が使われることも多い

ガウス・ザイデル法の欠点

式の中にi-1行目の計算結果 $x_{i-1}^{(k+1)}$ が含まれるので, i=0からn-1で**逐次的に**計算しなければならない

並列計算しにくい(できなくはないけど…)



ヤコビ法はi=0からn-1まですべて独立して計算可能 \Rightarrow **並列化が容易**

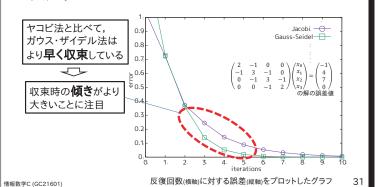
今回の講義内容

- 今日の問題
- ヤコビ法とガウス・ザイデル法
- SOR法
- 共役勾配法
- 前処理付き共役勾配法

情報数学C (GC21601) 30

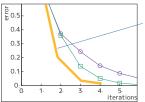
SOR法 計算の並列性を保ったまま反復解法の**収束性**や

安定性を高めるには?



SOR法

傾きを大きくするにはどうすれば良いのか?



こんな風に**傾きが大きく**なれば **収束は早い**(反復数が少なくなる)? 誤差グラフ上の傾き:

$$x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}$$

kステップ目の解とk + 1ステップ での解の差が傾き

例えば、ヤコビ法の式で得られた $\mathbf{m}_{x}^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,l}} (b_{i} - \Sigma_{j=0 - n-1,j \neq i} a_{i,j} x_{j}^{(k)})$ を そのまま使わずに傾きを大きくするようにしたら・・・

機和新做C (CC21C01)

- -

SOR法

逐次加速緩和法

(Successive Over-Relaxation: SOR法)

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega(x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)})$$
 誤差グラフの傾き

傾きを大きく(加速)するための係数

桁落ちを防ぎたい場合は: $x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \omega x_i^{(k+1)}$

情報数学C (GC2160

情報数学C (GC21601)

SOR法

加速係数ωの決め方

- 基本的には1 < ω < 2の範囲で
 問題ごとに設定する必要がある*
 (安定性のために0 < ω < 1を使うことはある)
- ・ 正定値対称行列を係数とするAx = bについては、 $0 < \omega < 2$ で**必ず収束する**ことが証明されている(Ostrowskiの定理)
- ω = 1でガウス・ザイデル法と同じ。
 ω < 1でガウス・ザイデル法で収束しなかった
 問題でも収束する可能性あり(あくまで可能性だけど)

*問題によっては自動で決定できるものもあるが、一般的にこれという決定法があるわけでなく、問題毎に試行錯誤することが多い. 34

情報数学C (GC21601

33

SOR法

SOR法のコード例

```
int k;// 計算反復回数
for(k = 0; k < max_iter; ++k){
    int l = 0;
    for(int i = 0; i < n; ++i){
        double tmp = x[i];
        x[i] = A[i][n];
        for(int j = 0; j < n; ++j){
            x[i] -= (j != i ? A[i][j]*x[j] : 0.0);
        }
        x[i] /= A[i][i];

    // 加速緩和係数wを使って次の解を計算
    x[i] = (1.0-w)*tmp+w*x[i];
    }

    // 収束判定
    ...
}
```

SOR法

SOR法の実行結果例(ヤコビ法,ガウス・ザイデルと問題が違うので注意)

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 4 \\ 7 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{\mathbb{R}} (1,3,4,2)$$

加速係数は ω = 1.15と設定 (0.05刻みで試行した結果)

```
0 : x0 = -0.575, x1 = 1.3129167, x2 = 3.1866181, x3 = 1.8323054
1 : x0 = 0.26617708, x1 = 2.6599673, x2 = 3.9273785, x3 = 1.9833968
2 : x0 = 0.91455464, x1 = 2.9994126, x2 = 4.0008535, x3 = 2.0029812
3 : x0 = 1.0073041, x1 = 3.0045652, x2 = 4.0027648, x3 = 2.0011426
4 : x0 = 1.0015294, x1 = 3.0009613, x2 = 4.0003918, x3 = 2.0000539
5 : x0 = 1.0003233, x1 = 3.0001299, x2 = 4.000117, x3 = 1.9999986
6 : x0 = 1.000262, x1 = 2.9999995, x2 = 3.9999958, x3 = 1.9999978
7 : x0 = 0.9999932, x1 = 2.9999965, x2 = 3.9999985, x3 = 1.9999994
8 : x0 = 0.99999999, x1 = 3, x2 = 4, x3 = 2
```

反復10回目で許容誤差(1×10⁻⁶)内の解に収束

情報数学C (GC21601)

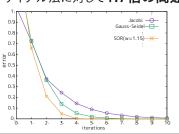
36

SOR法

ヤコビ法, ガウス・ザイデル法との反復回数の比較 ヤコビ:30回, ガウス・ザイデル:17回, SOR法(ω = 1.15):10回

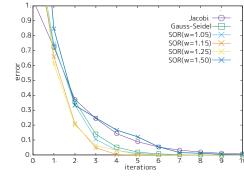
1回の反復にかかる計算コストはほぼ同じなので,

- ヤコビ法に対して3倍の高速化
- ガウス・ザイデル法に対して1.7倍の高速化



SOR法

加速係数を変えた場合は?



ω	反復回数
1.05	15
1.15	10
1.25	13
1.5	24

係数行列Aによっては 最適なωを計算可能 だけど、多くの場合は 問題毎に値を選択 する必要あり

情報数学C (GC21601)

今回の講義内容

- 今日の問題
- ヤコビ法とガウス・ザイデル法
- SOR法

情報数学C (GC21601)

- 共役勾配法
- 前処理付き共役勾配法

文学C (GC21601)

共役勾配法の前に

残差について

 $Ax = \mathbf{b}$ を変形すると $\mathbf{b} - Ax = 0$

xが真値ならこの式となるが、kステップ目の近似解の段階では、 $b-Ax^{(k)} \neq 0$

残差 $r^{(k)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)}$

(ここでの残差はベクトル ということに注意)

□ 反復処理で**残差を如何にして** ゼロベクトルに近づけるかが重要 ⇒ 残差についてもう少し考えてみよう!

情報数学C (GC21601)

共役勾配法の前に

Ax = b の両辺にIxを足す

Ax + Ix = b + Ix $\Rightarrow x = b + (I - A)x$

これを反復式とすると

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

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

代入

k + 1ステップでの残差ベクトルは:

残差ベクトル

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

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$
も使って整理すると: $r^{(k+1)} = (I-A)r^{(k)}$

特報数学C (GC21601) 41

共役勾配法の前に

前のページの赤枠の式を初期値 $x^{(0)}$, $r^{(0)}$ との関係式にしてみると:

$$\mathbf{r}^{(k)} = (I - A)^k \mathbf{r}^{(0)}$$

$$x^{(k+1)} = r^{(k)} + r^{(k-1)} + \dots + r^{(0)} + x^{(0)}$$

上の式を下の式に代入してやると,

$$r^{(k+1)}$$
. $x^{(k+1)}$

$$m{r}^{(0)}$$
, $Am{r}^{(0)}$, ... , $A^km{r}^{(0)}$ の 線形結合で表される

$$a_0 \mathbf{r}^{(0)} + a_1 A \mathbf{r}^{(0)} + a_2 A^2 \mathbf{r}^{(0)} + \dots + a_k A^k \mathbf{r}^{(0)}$$
という形の式

クリロフ部分空間

ベクトル $m{r}^{(0)}$, $Am{r}^{(0)}$,..., $A^km{r}^{(0)}$ の線形結合で表される部分空間

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} \in \operatorname{span}\{\boldsymbol{r}^{(0)}, A\boldsymbol{r}^{(0)}, \dots, A^k\boldsymbol{r}^{(0)}\}$$

クリロフ部分空間

 $\mathcal{K}_n(A, \boldsymbol{v}) = \operatorname{span}\{\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}, A^2\boldsymbol{v}, \dots, A^{n-1}\boldsymbol{v}\}\$

 $x^{(0)}$ からスタートして、クリロフ部分空間 \mathcal{K}_n の中を探索することで解を得る**非定常反復法***

⇒ クリロフ部分空間法

情報数学C (GC21601)

*前半のヤコビ法,ガウス・ザイデル法は<u>定常反復法</u> 43

クリロフ部分空間法

クリロフ部分空間法の種類

- 共役勾配法(きょうやくこうばいほう, Conjugate Gradient method: CG法)
- 双共役勾配法(BiCG法)
- 安定化双共役勾配法(BiCGSTAB法)
- 共役残差法(CR法)
- 一般化共役残差法(GCR法)
- · 一般化最小残差法(GMRES法)

などなど

情報數学C (GC21601)

共役勾配法

共役勾配法(CG法)

- **正定値対称疎行列**を対象とした非定常反復解法
- Arnoldi法を対称行列に限定した<u>Direct版のLanczos法</u>*を <u>Projection法</u>で残差ベクトルの<u>直交・共役関係</u>を用いて線 形システムの解法にしたもの (リンク先をたどればアルゴリズムの導出 過程が分かるが長いので興味と意欲のある場合だけ見てください)
- 収束が非常に早い(ほとんどの場合SOR法より早い)
- **前処理**で更に収束を早めることができる

情報数学C (GC21601

*CG法の元になったArnoldi法とかLanczos法もクリロフ部分空間法の一種 45

共役勾配法の計算手順

- 1. 初期近似解x⁽⁰⁾を設定
- 2. 初期近似解に対する**残差r^{(0)}を計算, 修正方向ベクトルp^{(0)}を初期化: r^{(0)} = b Ax^{(0)}, p^{(0)} = r^{(0)}**
- 3. 以下のaからgの処理を収束するまで反復(k = 0,1,2,...)
 - a. $y^{(k)} = Ap^{(k)}$ を計算
 - b. 修正係数 $\alpha^{(k)} = \frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{p^{(k)} \cdot y^{(k)}}$ を計算
 - c. k+1ステップの**近似値** $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} p^{(k)}$ を計算
 - d. k+1ステップの**残差** $r^{(k+1)}=r^{(k)}-\alpha^{(k)}y^{(k)}$ を計算
 - e. $\| m{r}^{(k+1)} \| < \varepsilon$ なら収束したとして反復終了
 - f. 方向ベクトル $m{p}$ の修正係数 $m{eta}^{(k)}=rac{r^{(k+1)}\cdot r^{(k+1)}}{r^{(k)}\cdot r^{(k)}}$ を計算
 - g. k+1ステップの**方向ベクトル** $p^{(k+1)}=r^{(k+1)}+\beta^{(k)}p^{(k)}$ を計算

情報数学C (GC21601

46

共役勾配法のコード例

二次元配列A[][]に係数行列Aを格納,配列b[]に右辺項ベクトルbを格納解 $x^{(k)}$ は配列x[]に入れて返す.

共役勾配法のコード例

```
3の反復処理 a~g のコード例
                                                                      a. y^{(k)} = Ap^{(k)}
  for(k = 0; k < max_iter; ++k){
// v = AP の計算
                                                                     b. 修正係数 \alpha^{(k)} = \frac{r^{(k)} \cdot r^{(k)}}{p^{(k)} \cdot y^{(k)}}
           v[i] = dot(A[i], p, n);
      // alpha = r*r/(P*AP)の計算
alpha = rr0/dot(p, y, n);
                                                                      c. 次ステップの近似値
                                                                            \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \, \mathbf{p}^{(k)}
       // 解x、残差rの更新
for(int i = 0; i < n; ++i){
    x[i] += alpha*p[i]; r[i] -= alpha*y[i];
                                                                      d. 次ステップの残差
                                                                          r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k)} y^{(k)}
                                                   後のためにr^{(k+1)} \cdot r^{(k+1)}を計算しておく
       // (r*r) (k+1)の計算
       rr1 = dot(r, r, n);
                                                                     e. 収束判定 ||\mathbf{r}^{(k+1)}|| < \varepsilon
       // 収束判定 (||r||<=eps)
      e = sqrt(rr1);
if(e < eps) break;
                                                             f. 方向ベクトルpの修正係数
                                                                \beta^{(k)} = (\mathbf{r}^{(k+1)} \cdot \mathbf{r}^{(k+1)}) / (\mathbf{r}^{(k)} \cdot \mathbf{r}^{(k)})
       // βの計算とPの更新
                                                                          g. k+1ステップの方向ベクトル
       for(int i = 0; i < n; ++i) p[i] = r[i]+beta*p[i];</pre>
       rr0 = rr1; // (r*r)_(k+1)を次のステップのために確保しておく
```

共役勾配法の実行結果例

共役勾配法(CG法)の実行結果例

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 4 \\ 7 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{AP}$$

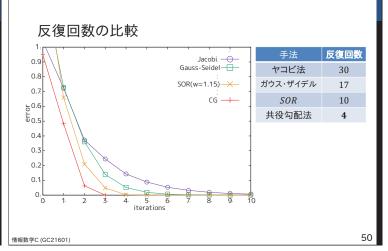
解) (1,3,4,2)

```
0: x0 = -0.44295302, x1 = 1.7718121, x2 = 3.1006711, x3 = 0
1: x0 = 0.41958577, x1 = 3.1012624, x2 = 3.7012405, x3 = 1.8587355
2: x0 = 0.88691069, x1 = 2.9264458, x2 = 4.0201937, x3 = 2.082929
3: x0 = 1, x1 = 3, x2 = 4, x3 = 2
```

反復4回目で許容誤差(1×10⁻⁶)内の解に収束

情報数学C (GC21601)

49



共役勾配法の実行結果例

今回の講義内容

- 今日の問題
- ヤコビ法とガウス・ザイデル法
- SOR法
- 共役勾配法
- 前処理付き共役勾配法

情報数学C (GC21601

51

前処理付き共役勾配法

共役勾配法の収束を**さらに早められないか**?

⇒ 三角分解のように前処理で何かできるか?



前処理付き共役勾配法

- ・修正コレスキー分解付き共役勾配法(MCCG法)
- ・不完全コレスキー分解付き共役勾配法(ICCG法) など

情報数学C (GC21601)

前処理付き共役勾配法

係数行列Aによって収束が変わる?

⇒ 条件数 で収束の早さを測れる

係数行列Aを**条件数が小さく**なるようにしてやればよい

ある正則行列* M_1, M_2 を使ってAx = bを書き換え

$$(M_1AM_2)(M_2^{-1}x)=M_1m{b}$$
 $^{(元の式と解は }$ 変わらないことに注意)

$$(M_1AM_2)\mathbf{y} = M_1\mathbf{b}$$
$$M_2^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{v}$$

(三角分解の時と同じ ようにすれば解ける)

*正則行列は行列式が0でない,つまり逆行列がある行列のこと 53

前処理付き共役勾配法

条件数とは?

条件数: $cond(A) = ||A^{-1}|| ||A||$

- その定義より、 $cond(A) \ge 1$
- <u>行列のノルム</u>としてp = 20p ノルムを用いた場合は, cond(A)はAの最大,最小固有値の比の平方根
- ・ 線形システムAx = bにおける条件数は右辺項ベクトルbが変化したときに**解xがどれだけ変化**するのかを表す
 - ⇒ 条件数が大きいとbの小さな誤差も xの大きな誤差として現れてしまう

 $\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \le \operatorname{cond}(A) \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$ (条件数を小さくしたし

 $\|x\|$

情報数学C (GC2160

前処理付き共役勾配法

不完全コレスキー分解付き共役勾配法(ICCG法)

$$A = LDL^T$$
と分解 $\Rightarrow U = D^{\frac{1}{2}}L^T$ と置き換える*

$$U^{-T}AU^{-1}Ux = U^{-T}b$$

$$(U^{-T}AU^{-1})y = U^{-T}b$$

$$Ux = y$$

情報数学C (GC21601)

*Dは対角行列なので $D^{\frac{1}{2}}$ は単に対角要素に平方根をつければよい 55

(導出過程は

こちらを参照)

前処理付き共役勾配法

 $U^{-T}AU^{-1}$ の条件数は $?(U^{-T}AU^{-1}$ を変形してみる) $U = D^{1/2}L^{T} h \dot{b} U^{T} = LD^{1/2}, U^{-1} = L^{-T}(D^{1/2})^{-1}$ $U^{-T}AU^{-1} = (D^{1/2})^{-1}L^{-1}AL^{-T}(D^{1/2})^{-1}$ $A = LDL^{T} h \dot{b} L^{-1} A L^{-T} = D$ $U^{-T}AU^{-1} = (D^{1/2})^{-1}D(D^{1/2})^{-1}$ 対角行列の逆行列は対角成分の逆数をとったもの

 $U^{-T}AU^{-1} = I$

単位行列の条件数は1

ICCG法の計算手順

1. 初期近似解x⁽⁰⁾を設定

2. 不完全コレスキー分解でL.Dを計算

初期近似解に対する**残差r^{(0)}**を計算,**修正方向ベクトルp^{(0)}**を初期化: $r^{(0)}=b-Ax^{(0)},\ p^{(0)}=\frac{(LDL^T)^{-1}}{2}r^{(0)}$

ICCG法の計算手順

4. 以下のaからgの処理を収束するまで反復(k = 0,1,2,...)

a. $\mathbf{y}^{(k)} = A\mathbf{p}^{(k)}$ を計算

b. 修正係数 $\alpha^{(k)} = \frac{r^{(k)} \cdot (LDL^T)^{-1}}{p^{(k)} \cdot y^{(k)}}$ を計算

c. k+1ステップの**近似値** $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} p^{(k)}$ を計算

d. k + 1ステップの**残差** $r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k)} v^{(k)}$ を計算

e. $\|\mathbf{r}^{(k+1)}\| < \varepsilon$ なら収束したとして反復終了

f. $(LDL^T)^{-1}$ を残差に掛ける $\hat{r}^{(k+1)} = (LDL^T)^{-1} r^{(k+1)}$ g. 方向ベクトルpの修正係数 $\beta^{(k)} = \frac{r^{(k+1)}, \hat{r}^{(k+1)}}{r^{(k)}, \hat{r}^{(k)}}$ を計算

h. k+1ステップの**方向ベクトル** $p^{(k+1)} = \tilde{r}^{(k+1)} + \beta^{(k)}p^{(k)}$ を計算

前ページのアルゴリズムで $p^{(0)} = (LDL^T)^{-1}r^{(0)}$ と $\tilde{r}^{(k+1)} = (LDL^T)^{-1}r^{(k+1)}$ は $(LDL^T)^{-1}$ を直接計算するのではなく,

$$L\mathbf{y} = \mathbf{r}^{(k+1)}$$
$$(DL^T)\tilde{\mathbf{r}}^{(k+1)} = \mathbf{y}$$

として,前進代入と後退代入で解く

ICCGのコード例はCG法のコード例と計算順 はほぼ同じなので省略

ICCG法の実行結果例

ICCG法の実行結果例

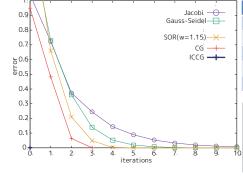
$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 4 \\ 7 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{\mathfrak{R}} (1,3,4,2)$$

0: x0 = 1, x1 = 3, x2 = 4, x3 = 2

反復1回目で許容誤差(1×10⁻⁶)内の解に収束

共役勾配法の実行結果例

反復回数の比較



SOR 10 CG4 ICCGICCGでは係数行列が単位行 列になるので1回で収束する.

ヤコビ法

ガウス・ザイデル

一 反復回数

30

17

ただし、実際にはIC分解に近似が含まれるため、特にnが大きい と誤差により1回では収束し なくなる

今回のまとめ

- 今日の問題: Ax = b
- ヤコビ法とガウス・ザイデル法
 - 定常反復法による解法
- SOR法
 - 加速係数を用いて収束を早める方法
- 共役勾配法
 - クリロフ部分空間法による解法
- 前処理付き共役勾配法
 - 条件数とICCG法

情報数学C (GC21601)

Appendix

(以降のページは補足資料です)

行列のノルム

ベクトルのノルム:空間におけるベクトルの長さ

ユークリッドノルム

最大値ノルム

 $||x||_2 = \sqrt{|x_1|^2 + \dots + |x_n|^2}$

 $||x||_{\infty} = \max(|x_1|, ..., |x_n|)$

p ーノルム

 $||x||_p = (|x_1|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}$

 \Rightarrow ベクトルのノルムの性質:正定値性: $||x|| \ge 0$,

斉次性(せいじせい): $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, 劣加法性: $||x + y|| \le ||x|| + ||y||$

行列のノルム:ベクトルのノルムを行列に対し一般化したもの

⇒ つまり, 正定値性: ||A|| ≥ 0, 斉次性: ||αA|| = |α|||A||,

劣加法性: $||A + B|| \le ||A|| + ||B||$ を満たすもの(ベクトルノルムと同じく複数の定義がある)

行列のノルム

 $||A||_p = \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||_p}{||x||_p}$:ベクトルに行列を掛けたときの そのベクトルの拡大率

 $(p = 1 \ge p = \infty$ の場合)

 $\|A\|_1 = \max_{0 \le j < n} \sum_{i=0} \left|a_{i,j}\right|$:列ごとに絶対値の和をとった数値で最大のもの

 $\|A\|_{\infty} = \max_{0 \le i < n} \sum_{j=0}^{n} \left|a_{i,j}\right|$:行ごとに絶対値の和をとった数値で最大のも とった数値で最大のもの

ちなみに,p=2(ユークリッドノルム)で正方行列だとスペクトルノルムと呼ばれ, A*Aの最大固有値の平方根になる(A*はAの随伴行列(転置+複素共役))

 $\rho(A)$ を行列Aのスペクトル半径(最大固有値の絶対値)とすると, 行列のノル ム(誘導ノルム)に対して

 $||A|| \ge \rho(A)$

が成り立つ(証明は省略). そのため、 $\|A\| < 1$ の条件は、最大固有値の絶 対値が1より小さい($\rho(A)$ < 1)と考えることもできる.

63

*他にもフロベニウスノルム, 最大ノルム, トレースノルムなどがある 64

行列のノルム

行列Mのpノルム

$$||H||_{\infty} = ||D^{-1}(L+U)||_{\infty} = \max_{0 \le i < n} \sum_{j=0, j \ne i}^{n-1} \left| \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} \right| = \max_{0 \le i < n} \frac{\sum_{j \ne i} |a_{i,j}|}{|a_{i,i}|}$$

$$\underset{||A| \le i + 1}{\underset{|A| \le i + 1}{\text{max}}} \sum_{j=0, j \ne i} |a_{i,j}|$$

$$\|H\|_{\infty} < 1 \implies 0 \le i < n$$
で $\frac{\sum_{j \ne i} |a_{i,j}|}{|a_{i,i}|}$ の最大が1を超えないということなので $\frac{\sum_{j \ne i} |a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} < 1$ $(i = 0 \sim n - 1)$ が収束条件になる

定常反復法と非定常反復法

定常反復法とは?

Ax = bの解を求める漸化式(ぜんかしき)が

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = C\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{d}$$

という線形*の形になっている方法(線形反復法ともいう) ⇒講義で紹介した以外にもADI法,マルチグリッド法なども

非定常反復法とは?

Ax = bの解を求める漸化式が非線形・非定常な 反復解法

⇒一般的に定常反復法より収束は速い.

クリロフ部分空間法の他にチェビシェフ準反復法なども

*ヤコビ法で $x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ij}} \left(b_i - \sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j^{(k)} \right)$