数値解析（松尾）　補足資料　　　　2019 年 10 月 28 日

連立一次方程式に対する共役勾配法の導出

講義で割愛した，アルゴリズム導出の概略を説明する（参考：[1, 2] 等）．最適化（→今期講義『最適化手法』）と密接に関係し，面白い数理構造が表出するので，興味がある人は導出を追ってみるとよい．

以下の戦略に沿って導出する．

1. 行列 A が実対称正定値のとき，$Ax = b$ の解法が二次最適化に帰着できることを示す．
2. それに対する勾配降下法を構成する．ただしそこで最急降下は良い戦略にならない．
3. 最急降下方向を「A 直交化」したとき，降下法が有限回で終わることを示す．
4. その降下法が資料で示した CG 法アルゴリズムと一致することを示す．

問題の次元を n とし，真の解を $x^\star$ で表す．記号 $(\cdot,\cdot)$，$\|\cdot\|$ は通常の $\mathbb{R}^n$ の内積とノルムとする．

１．二次最適化への帰着

$\tilde{\phi}(x) = \frac{1}{2}\left(x - x^\star, A(x - x^\star)\right)$ と置くと，A の正値性よりこの最適化は $Ax = b$ の求解と同値．さらに $\tilde{\phi}(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b) + \frac{1}{2}(x^\star, b)$ であり，この最小化は $\phi(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b)$ の最小化と同値．以降，この問題を考える．

２．降下法の構成

初期解 x_0，および各段の探索方向 p_k $(k = 0, 1, \ldots)$ が与えられているとする（探索方向が事前に分かっているとするのは現実的設定ではないが，どう取るかは後で考える）．このとき，第 k 段（$k = 0, 1, \ldots$）における最小化問題 $\min_{\alpha_k \in \mathbb{R}} \phi(x_k + \alpha_k p_k)$ の最適値を与えるステップ幅 α_k は $\alpha_0 = (r_k, p_k)/(p_k, Ap_k)$．これで降下法を構成したものを**アルゴリズム原型（その１）**とする．

アルゴリズム原型（その１）

x_0: given; $p_0, p_1, \ldots$: given
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
　$\alpha_k := (r_k, p_k)/(p_k, Ap_k)$
　$x_{k+1} := x_k + \alpha_k p_k$
}

探索方向 $\{p_k\}$ としては，素朴には最急降下方向が考えられる．これを計算すると $p_k = -\nabla\phi(x_k) = b - Ax_k =: r_k$．すなわち，この問題における最急降下方向は，その時点での残差 r_k で与えられる．しかし（最適化の講義で習っているように）これは一般には良い選択とはならない．

３．「A 直交」な探索方向列による降下法

定義 1 (A 直交) ベクトル列 $\{p_i\}_{i=0}^{k}$ が「A 直交」するとは，$p_i \neq 0$ $(i = 0, \ldots, k)$ かつ $(p_i, Ap_j) = 0$ $(0 \leq i < j \leq k)$ を満たすことを言う．

アルゴリズム原形（その１）において，探索方向を原則的には最急降下方向にとるが，しかしながらそれらが A 直交列になるように直交化することを考える．これは以下のように Gram–Schmidt の直交化の変形で実現できる（数学的には A を計量とする内積空間における GS 直交化になる．興味がある人は本資料の

議論全体を計量を入れた内積 $(\cdot,\cdot)_A$，ノルム $\|\cdot\|_A$ で書き直してみよ）.

$$
\begin{aligned}
p_0 &= r_0, \qquad \text{（最急降下）}\\
p_1 &= r_1 - \frac{(r_1, Ap_0)}{(p_0, Ap_0)} p_0,\\
&\vdots \quad \vdots\\
p_k &= r_k - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{(r_k, Ap_i)}{(p_i, Ap_i)} p_i.
\end{aligned}
$$

探索方向を，このようにとる降下法を**アルゴリズム原型（その２）**とする.

アルゴリズム原型（その２）

x_0: given
$r_0 := b - Ax_0$; $p_0 := r_0$
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
  $\alpha_k := (r_k, p_k)/(p_k, Ap_k)$
  $x_{k+1} := x_k + \alpha_k p_k$; $r_{k+1} := b - Ax_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k$
  $p_{k+1} := r_{k+1} - \sum_{i=0}^{k} \frac{(r_{k+1}, Ap_i)}{(p_i, Ap_i)} p_i$
}

この解析には，Krylov 部分空間の概念を入れると便利である.

定義 2 (Krylov 部分空間) ある $v \in \mathbb{R}^n$ に対し，$\mathcal{K}_k(A, v) := \mathrm{span}(v, Av, \ldots, A^{k-1}v)$ を（A により v から生成される）Krylov 部分空間と呼ぶ.

当然ながら $\mathcal{K}_k(A, v) \subseteq \mathcal{K}_{k+1}(A, v)$ かつ $\dim \mathcal{K}_k(A, v) \le k \le n$.（$\dim \mathcal{K}_n(A, v)$ は v に依存し決まる）.

定理 1 行列 A が実対称正定値のとき，アルゴリズム原型（その２）は破綻せず，その生成する $\{x_k\}$ は，（丸め誤差がない場合には）ある $k \le n$ に対し $x_k = x^\star$ を満たす.

（略証）アルゴリズム原形（その２）において，各段で $p_k \ne 0 \Leftrightarrow r_k \ne 0$ が示せる．ゆえにアルゴリズムは破綻しない．さらに $\mathrm{span}(p_0, \ldots, p_k) = \mathrm{span}(r_0, \ldots, r_k) = \mathcal{K}_{k+1}(A, r_0)$ が成り立ち，主張はこれらより明らか.（なお数学的には，アルゴリズムが止まる k は $k = \dim \mathcal{K}_n(A, v)$ である.） ■

４．降下法アルゴリズムの簡略化：CG 法の発見

前段で述べた内容により，実は $(r_{k+1}, Ap_j) = 0$ $(0 \le j \le k-1)$ が成り立つ．よって，アルゴリズム原型（その２）の最終行の和を簡略化でき，配付資料の CG 法アルゴリズムを得る.

参考文献

[1] 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算の数理, 岩波書店, 東京, 2009.

[2] 櫻井鉄也, 松尾宇泰, 片桐孝洋（編），数値線型代数の数理と HPC, 共立出版, 東京, 2018.