数理逍遥 II[16C1115] Topics in Mathematics。
担当：DAHAN Xavier 2016, December 22nd

連立 1 次方程式系、降下法

復習 $A \in \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{R})$ a symmetric positive definite matrix: $\forall x \in \mathbb{R}^n,\ x \neq 0,\ x^T Ax > 0.$

記号: $\langle x, y\rangle := x^T y$, $\mathbb{R}^n$ 上の自然な内積。$\langle x, y\rangle_A := x^T Ay$, A に対する内積。$\langle x, y\rangle_A = 0$ のとき、x と y と A-直行で、あるいは**共役**だと言う。

$$Ax^\star = b \Leftrightarrow g(x^\star) = \min_{x\in\mathbb{R}^n} g(x), \qquad \text{ただし} \quad g(x) = \langle x, x\rangle_A - 2\langle x, b\rangle. \tag{1}$$

また、$v \in \mathbb{R}^n$ に対して、もし $\langle v, b-Ax\rangle \neq 0$ ならば、$t = \frac{\langle v, b-Ax\rangle}{\|v\|_A^2}$ とすると $g(x+tv) < g(x)$ が成り立つ。

一般な降下法

$$\text{初期化}\begin{cases} \mathrm{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n, \text{ 初期ベクトル. (initial vector)} \\ r^{(0)} = b - Ax^{(0)} \text{ 初期残差 (first residual error)} \\ \text{降下方向 :} v^{(1)} = r^{(0)}, \text{ 最初の反復 (降下方向 } v^{(1)} \text{を選ぶと、} t_1 \text{も定まる).} \\ x^{(1)} = x^{(0)} + t_1 v^{(1)}, \text{ ただし } \mathbb{R} \ni t_1 = \frac{\langle v^{(1)}, r^{(0)}\rangle}{\|v^{(1)}\|_A} \end{cases} \tag{2}$$

次の反復は、以下の通りになる：

$$\left.\begin{array}{l} r^{(k)} = b - Ax^{(k)} \\ \text{降下方向 } v^{(k+1)} \text{ を選んで } t_{k+1} = \frac{\langle v^{(k+1)}, r^{(k)}\rangle}{\|v^{(k+1)}\|_A^2} \text{を計算する。} \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_{k+1} v^{(k+1)}. \end{array}\right\} \tag{3}$$

降下方向 $v^{(2)}, \ldots$ の選択では余裕があるが、その方向にどの程度行く（方向に沿って走る距離）のは定める：t_k の選択では余裕がない。

最速降下（最急降下、勾配降下とも言える）における降下方向の選択：

$$v^{(k+1)} = r^{(k)}\ (= b - Ax^{(k)}) \qquad \text{とする.} \qquad t_{k+1} = \frac{\|r^{(k)}\|_2^2}{\|r^{(k)}\|_A^2} \text{ となる.} \tag{4}$$

最速といっても、収束が遅く使われていない。

共役勾配法における降下方向の選択：

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}. \qquad \langle\,.\,,\,.\,\rangle_A \text{ の内積に対する Gram-Schmidt による} \\ \text{降下方向 } v^{(k+1)} = r^{(k)} - \sum_{\ell=1}^{k} \frac{\langle v^{(\ell)}, r^{(k)}\rangle_A}{\|v^{(\ell)}\|_A^2} v^{(\ell)}. \tag{5}$$

収束：A は「不良条件」(ill-conditioned) の行列でなけらば、$\sqrt{n}$ 反復程度だけでよい近似を与える。「不良条件」とは最大固有値と最低固有値の差が大きいという意味である。

ただ、反復ごとに $\langle v^{(\ell)}, r^{(k)}\rangle_A,\quad \ell = 1,\dots,k-1$ を計算しなければならないし、また $\|v^{(\ell)}\|_A^2$ の値を記録しなければならない。従って、効率ではない方法である。しかし、共役勾配法では、かなり工夫が入っていて降下方向の $v^{(k)}$、それに付随する t_k などの計算を効率化したものである。

取りあえず、以下の結果を証明できるが、やや面倒で省く：

定理６： 公式 (5) による定義した降下方向 $v^{(1)},\dots,v^{(k)}$ とし、公式 (3) による定まる, $t_1,\dots,t_k$, $x^{(1)},\dots,x^{(k)}$, $r^{(1)}$, $\dots$, $r^{(k)}$ とする。

$$\forall i = 1,\dots,k \quad \langle r^{(k)}, v^{(i)}\rangle = 0.\square$$

降下方向 $v^{(k)}$ の選択に関する効率化：

$$v^{(k)} = r^{(k-1)} + s_{k-1}v^{(k-1)}, \quad \text{ただし} \quad s_{k-1} = -\frac{\langle v^{(k-1)}, r^{(k-1)}\rangle_A}{\|v^{(k-1)}\|_A^2} \tag{6}$$

をすれば、公式 (5) における Gram-Schmidt による $v^{(k)}$ と同値だと証明できる。その上、以下の等式が成立することになる (証明を省く).

$$\begin{cases} \langle v^{(k)}, v^{(i)}\rangle_A = 0, & \forall i = 1,\dots,k-1 \\ \langle v^{(k)}, r^{(k)}\rangle = 0. & \\ \langle r^{(i)}, r^{(j)}\rangle = 0 \ \ i \neq j \text{ のとき } \forall 1 \le i \le k,\ \forall 1 \le j \le k, & \end{cases}$$

t_k, s_k, $r^{(k)}$ の計算に関する効率化： 上述された降下方向 $v^{(k)}$ の計算を効率化できるだけではなく、共役勾配法におけるほかの値 t_k, s_k, $r^{(k)}$ も効率化できる。ここも、証明を省く。

$$t_k = \frac{\|r^{(k-1)}\|_2^2}{\|v^{(k)}\|_A^2}, \quad r^{(k)} = r^{(k-1)} - t_kAv^{(k)}, \quad s_k = \frac{\|r^{(k)}\|_2^2}{\|r^{(k-1)}\|_2^2},$$

共役勾配法のステップ（まとめ）:

1. 最初の反復 ($k = 0$) → 最速降下法と同じ、公式 (2) で $x^{(0)}$, $r^{(0)}$, $v^{(1)} = r^{(0)}$, t_1, x_1 が定まる。

2. 第２回目の反復から $k = 1, 2, \dots,$、以下の順番で計算する。

   (a) $t_k = \frac{\|r^{(k-1)}\|_2^2}{\|v^{(k)}\|_A^2}$.

   (b) $x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_kv^{(k)}$

   (c) $r^{(k)} = r^{(k-1)} - t_kAv^{(k)}$

   (d) $s_k = \frac{\|r^{(k)}\|_2^2}{\|r^{(k-1)}\|_2^2}$

   (e) $v^{(k+1)} = r^{(k)} + s_kv^{(k)}$

Exercise 1 The purpose of this exercise is to compare the steepest descent method and the conjugate gradient descent method on the following system of linear equation:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} \qquad A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = b.$$

(a) Verify that A is symmetric definite positive (the simplest way may be to use "criterion (iv) of Preliminary 2" in the sheet "Report 3-1" date December 1st).

(b) (initialization) Use Formula (2) to compute $r^{(0)},\ v^{(1)},\ t_1$ and $x^{(1)}$, starting with initial approximation $x^{(0)} = (0, 0)^T$.

(c) Use the iteration (4) of the steepest descent method to compute $r^{(1)} = v^{(2)},\ t_2$ and finally $x^{(2)}$.

(d) Use Gram-Schmidt orthogonalization (5) on $r^{(0)} = v^{(1)}, r^{(1)} = v^{(2)}$ to compute $V^{(1)} = v^{(1)}$ and $V^{(2)}$ such that $\langle V^{(2)}, V^{(1)} \rangle_A \approx 0$. Deduce $T_2 \in \mathbb{R}$ and $X^{(2)} \in \mathbb{R}^2$ using Formula (3).

(e) Check that you will get the same value $X^{(2)}$ by using directly the conjugate gradient formula (a)-(e) (共役勾配法のステップ（まとめ）)

<u>Remark:</u> 10 iterations of the steepest descent gives the approximation: $x^{(10)} = (-0.989, 1.978)^T$. Thus the steepest descent is very slow.

Exercise 2 In the general step of the conjugate gradient iteration (共役勾配法のステップ (まとめ)(a)-(e)), how many products matrix/vector are necessary ? How many vector/vector products?

If you would use Gram-Schmidt formula (5), how many matrix/vector products and vector/vector products?

Exercise 3 In the example of Exercise 1 (d)-(e), $n = 2$ iterations are sufficient to get an *exact* solution.

This is no coincidence, according to the following theorem.

Theorem 1 *Consider a system $Ax = b$, where $b \in \mathbb{R}^n$ and $A \in \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{R})$ is symmetric definite positive.*

Suppose that a descent method computes descent directions $v^{(1)},\ v^{(2)}, \ldots,\ v^{(n)}$ that are parwise conjugate. *Then for any initial vector $x^{(0)}$, the sequence of vectors $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)}$ computed from <u>Formula (3) exactly, without approximation</u> verify: $Ax^{(n)} = b$ (that is the n-th approximation $x^{(n)}$ is an exact solution).*

Remark:

- Here, such a descent method is therefore a *direct method*, not iterative.
- The conjugate gradient method verifies the assumption of the theorem, therefore the conjugate gradient can be seen as a direct method as well.

- However it is never used as a direct method since there are better direct methods for positive definite matrix, and ...
- ...for large n, sparse matrices, and when the eigenvalues of A are not too far away, we expect that only $\sqrt{n}$ iterations yield a good approximation. Therefore the conjugate gradient method is used as an iterative method.

(a) Show that it suffices to prove that $\langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle = 0$ for all $k = 1, \dots, n$.

(b) Prove that $Ax^{(n)} = Ax^{(0)} + t_1 Av^{(1)} + t_2 Av^{(2)} + \cdots + t_n Av^{(n)}$ (use Formula (3) assuming $v^{(i)}, v^{(j)}$ are conjugate when $i \neq j$).

(c) Deduce that $\langle Ax^{(n)} - b, v^{(k)} \rangle = \langle Ax^{(0)} - b, v^{(k)} \rangle + t_k \langle v^{(k)}, v^{(k)} \rangle_A$ (Remember that $\langle v^{(i)}, v^{(k)} \rangle_A = \langle v^{(i)}, Av^{(k)} \rangle$)

(d) (questions (d), (e), (f) are independent of (c)) Use the definition of t_k and the equality $b - Ax^{(k-1)} = b - Ax^{(0)} + Ax^{(0)} - \cdots - Ax^{(k-2)} + Ax^{(k-2)} - Ax^{(k-1)}$ to show that

$$t_k \|v^{(k)}\|_A^2 = \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle + \sum_{\ell=0}^{k-2} \langle v^{(k)}, A(x^{(\ell)} - x^{(\ell+1)}) \rangle.$$

(e) Show that $Ax^{(\ell)} - Ax^{(\ell+1)} = -t_{\ell+1} Av^{(\ell+1)}$.

(f) Deduce that $t_k \|v^{(k)}\|_A^2 = \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle - \sum_{\ell=0}^{k-2} t_{\ell+1} \langle v^{(k)}, v^{(\ell+1)} \rangle_A$. And then that $t_k \|v^{(k)}\|_A^2 = \langle v^{(k)}, b - Ax^{(0)} \rangle$.

(g) Conclude using Questions (c) and (f).