共役勾配法に関するある注意*

高　橋　磐　郎**

1. まえがき

連立一次方程式 $Ax=b$ を共役勾配法（Conjugate Gradient Method）でとく方法は数値解析の分野でよく知られた方法である（たとえば文献 1）参照）．一方上に凸な関数 $f(x)=f(x_1, \cdots\cdots, x_n)$ の最大点を逐次近似的に求める勾配法（Gradient Method）もよく知られた方法であるが，この論文の目的は，勾配法を拡張した方法を提案すること，さらにそれを連立一次方程式の解法に適用すると共役勾配法が生れることを示すにある．

2. 勾配法

勾配法とは，ある第 ν 近似値 x^ν を基にして，つぎの第 $\nu+1$ 近似 $x^{\nu+1}$ を

$$x^{\nu+1}=x^\nu+h^\nu\partial f(x^\nu),\ (\partial f=[\partial f/\partial x_1,\ \cdots\cdots,\ \partial f/\partial x_n]) \tag{1}$$

なる漸化式でつくりだす方法である．

h^ν は >0 なるスカラ量であるが，普通

$$f(x^\nu+h^\nu\partial f(x^\nu)) \tag{2}$$

が最大になるようにきめる．**f が微分可能で上に凸な関数**なら（2）式の最大点は（2）式を h^ν について微分して 0 とおいた条件できまる（今後この仮定がつねに成りたつとする）．

この方法は，$x^{\nu+1}$ をそれより 1 時点過去の x^ν に関する値のみを知って作りだすという方法であり，いわば単純マルコフ的である．

これを拡張して $x^{\nu+1}$ を x^ν に達するまでに進んだ方向 $p^{\nu-1}$ と，x^ν における $\partial f(x^\nu)$ の値との線形結合で作ろうというのがここで提案しようとする**拡張された勾配法**である．

3. 拡張された勾配法

初期ステップ　第 0 次近似 x^0 を任意に選ぶ．

$$p^0=\partial f(x^0), \tag{3}$$

$$x^1=x^0+\alpha^0 p^0 \tag{4}$$

で p^0, x^1 をきめる．ただし $\alpha^0>0$ は

$$f(x^0+\alpha^0 p^0) \tag{5}$$

が最大になるようにきめる．つまり

$$[\partial f(x^0+\alpha^0 p^0),\ p^0]=0 \tag{6}$$

（[A, B] は A と B との内積を示す）なる条件をみたすようにきめる．

繰返えしステップ　x^ν への修正方向が $p^{\nu-1}$ であるとき，それと $\partial f(x^\nu)$ との線形結合

$$p^\nu=\partial f(x^\nu)+\beta^\nu p^{\nu-1} \tag{7}$$

を $x^{\nu+1}$ への修正方向とする．すなわち

$$x^{\nu+1}=x^\nu+\alpha^\nu p^\nu. \tag{8}$$

このときスカラ量 α^ν, β^ν は（7）（8）式であらわされる $x^{\nu+1}$ に対して $f(x^{\nu+1})$ が最大になるようにきめる．その条件は

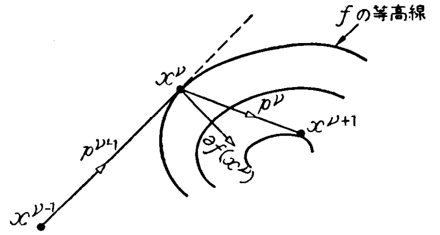
$$f(x^{\nu+1})=f(x^\nu+\alpha^\nu(\partial f(x^\nu)+\beta^\nu p^{\nu-1}))$$

を α^ν, β^ν について微分して 0 とおくことにより，

$$\left.\begin{aligned}[\partial f(x^{\nu+1}),\ p^\nu]&=0\\ [\partial f(x^{\nu+1}),\ p^{\nu-1}]&=0\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

とえられる．

繰返えしステップは**第 1 図**に示すような関係となる．



第 1 図　拡張された勾配法

4. 連立一次方程式の解法と 2 次関数の最大化問題との関係

正定値対称の係数行列をもつ場合

$$Ax=b \tag{10}$$

なる連立一次方程式をとくことは，A が正定値（positive deffinite）対称なら

$$f(x)=2b'x-x'Ax \tag{11}$$

の最大点を求める問題と同値である．

---

* A Note on the Conjugate Gradient Method, by Iwaro Takahashi (Waseda Univ., Tokyo)

** 早稲田大学生産研究所

なぜならAが正定値であるから A^{-1} が存在し，すべてのxに対して

$$(x-A^{-1}b)'A(x-A^{-1}b)\geqq 0 \qquad (12)$$

であり，(12) の $\geqq$ が $=$ となるなら

$$x-A^{-1}b=0 \qquad (13)$$

となる（一般にAが正定値対称なら，$y'Ay=0$ から $y=0$ が結果する）．(12) の左辺

$$x'Ax-2\,b'x+b'A^{-1}b \qquad (14)$$

を最小ならしめる，つまり (11) 式の $f(x)$ を最大ならしめるxが (10) 式の解である．また (10) 式の解は $f(x)$ の最大点である．

一 般 の 場 合

$$Bx=d \qquad (15)$$

で，Bが一般の行列のときはBが正則なら

$$(d-Bx)'(d-Bx)=d'd-2\,d'Bx+x'B'Bx \qquad (16)$$

の最小値を求めることと同値であることは容易にわかる．一般にBが正則なら $B'B$ は正定値対称であるから（Bが正則でないと $B'B$ は非負定値であることしかいえない），15式を

$$B'Bx=B'd \qquad (17)$$

と変形すれば，正定値対称の場合に帰着することができる．

この論文では，今後 (10) 式の形で A が正定値対称の場合のみを考えることにする．

5. 拡張された勾配法の連立一次方程式の解法への適用

(11) 式の $f(x)$ に対して **3**. の方法を適用してみよう．この $f(x)$ に対しては

$$\frac{1}{2}\,\partial f(x)=b-Ax \qquad (19)$$

であり，これは残差ベクトルをあらわすが，xに第ν次近似 x^ν を入れたときの残差を

$$r^\nu=b-Ax^\nu\ \left(=\frac{1}{2}\,\partial f(x^\nu)\right),\ (\nu=0,1,2,\cdots,n)$$ と

かくことにすると，(8) 式で $x^{\nu+1}$ がきまるから

$$r^{\nu+1}=r^\nu-\alpha^\nu Ap^\nu,\ (\nu=0,1,2,\cdots) \qquad (21)$$

が成りたつ．

3. の方法を使うと α^ν, β^ν はつぎのようになることがわかる．その導出をつぎにのべる．

まず (6) 式より

$$[r^1,p^0]=[r^0-\alpha^0Ap^0,p^0]=0 \qquad (22)$$

これより

$$\alpha^0=[r^0,p^0]/[p^0,Ap^0], \qquad (23)$$

(9) 式より

$$[r^{\nu+1},p^{\nu-1}]=0,\ (\nu=1,2,\cdots) \qquad (24)$$

これと (21) 式から

$$[r^\nu-\alpha^\nu Ap^\nu,p^{\nu-1}]=0,\ (\nu=1,2,\cdots). \qquad (25)$$

ふたたび (9) より

$$[r^{\nu+1},p^\nu]=0,\ (\nu=1,2,\cdots) \qquad (26)$$

これと (21) 式とから

$$[r^\nu-\alpha^\nu Ap^\nu,p^\nu]=0,\ (\nu=1,2,\cdots) \qquad (28)$$

これより

$$\alpha^\nu=[r^\nu,p^\nu]/[p^\nu,Ap^\nu],\ (\nu=1,2,\cdots) \qquad (30)$$

つぎに (22), (25), (26) 式より

$$[Ap^\nu,p^{\nu-1}]=0,\ (\nu=1,2,\cdots) \qquad (27)$$

これと (7) (19) 式とから

$$[A(2\,r^\nu+\beta^\nu p^{\nu-1}),p^{\nu-1}]=0,\ (\nu=1,2,\cdots) \qquad (29)$$

したがって

$$\beta^\nu=-2[p^{\nu-1},Ar^\nu]/[p^{\nu-1},Ap^{\nu-1}],\ (\nu=1,2,\cdots) \qquad (31)$$

〔注〕 (23) 式で $r^0=p^0\neq 0$ なるかぎり A の正定値性から $[p^0,Ap^0]\neq 0$. (30), (31) 式で $r^{\nu-1}\neq 0$ なるかぎり (26), (7), (19)式より $p^{\nu-1}\neq 0$, したがって $[p^{\nu-1},Ap^{\nu-1}]\neq 0$)

以上から手順をまとめると

$$p^0=r^0 \qquad (32)$$

として

$$x^{\nu+1}=x^\nu+\alpha^\nu p^\nu, \qquad (33)$$

$$r^{\nu+1}=r^\nu-\alpha^\nu Ap^\nu, \qquad (34)$$

$$p^{\nu+1}=2\,r^{\nu+1}+\beta^{\nu+1}p^\nu,\ (\nu=0,1,2\cdots) \qquad (35)$$

となる．これがいわゆる共役勾配法である．

6. 共役勾配法における諸性質の証明

共役勾配法の計算途上であらわれる $r^0,r^1,\cdots\cdots$ は直交系を，p^0, $p^1\cdots\cdots$は A-直交系を作るという性質がある．この関係をとおしてこの方法が次元の数以内のステップで解に達することが証明される．この証明はすでに多くの教科書）たとえば文献 1), 2), 3), など）にのっているが，ここでは **3**. の見地から整理した形でのべておこう．

〔定理〕

5. で作られた手順に従うとき，$r^0,r^1,\cdots$ は直交系を，$p^0,p^1,\cdots$ は A-直交系を作る．つまり

$$[r^i,r^j]=0,\ i\neq j \qquad (36)$$

$$[p^i,Ap^j]=0,\ i\neq j \qquad (37)$$

〔証明〕

証明は数学的帰納法により，つまり漸化的に行なう．(22), (32) 式より

$$[r^1,\ r^0]=0 \tag{38}$$

(27) 式より

$$[p^0,\ Ap^1]=0. \tag{39}$$

$r^0,r^1,\cdots,r^\nu$ についての直交性，$p^0,\ p^1,\cdots,p^\nu$ についてのA－直交性が成りたつと仮定すると；

$$[r^{\nu+1},\ r^\nu]=[r^{\nu+1},\ p^\nu-\beta^\nu p^{\nu-1}]=0 \tag{40}$$

((35) 式および (24), (26) 式より).

$$[r^{\nu+1},\ r^i]=[r^\nu-\alpha^\nu Ap^\nu,\ r^i] \tag{41}$$

((34) 式より)

$=-\alpha^\nu[Ap^\nu,\ r^i]$　　(仮定より)

$=-\alpha^\nu[Ap^\nu,\ p^i-\beta^{i-1}p^{i-1}]$　　((35)式より)

$=0$　　(仮定より)

$(i=0,\ 1,\cdots\cdots,\nu-1)$.

つぎに

$$[Ap^{\nu+1},\ p^\nu]=0 \quad ((27)\text{式より}) \tag{42}$$

$$[Ap^i,\ p^{\nu+1}]=[Ap^i,\ r^{\nu+1}-\beta^\nu p^\nu] \tag{43}$$

((35)式より)

$=[Ap^i,\ r^{\nu+1}]$　　(仮定より)

$=[r^i-r^{i+1},\ r^{\nu+1}]/\alpha^\nu$　　((34)式より)

$=0$　　(仮定より)

$(i=0,\ 1,\cdots,\ \nu-1)$.

したがって $r^0,r^1,\cdots,r^{\nu+1}$ の直交性，$p^0,\ p^1,\cdots,p^{\nu+1}$ の A- 直交性がいえる．

n 元連立一次方程式の場合' つまり $r=b-Ax$ の次元が n なら $r^0,\ r^1,\cdots,r^\nu$ が直交系をつくるから

$\nu\leqq n$ なる ν に対して $r^\nu=0$ となる．したがって **5.** の手順は繰返えしが n 以内で解に達する．

7. あとがき

ここで提案した拡張された勾配法を一般の凸関数の最大化問題に適用することも無論できるが，そのような実例はやってみなかった．それはこの論文のおもな目的が共役勾配法の別な角度からの導出にあったからである．このように，一つの方法を別の角度から導出することも，数値解析の理論上いみのないことではないと思われる．

参考文献

1) 森口繁一，高田　勝：数値計算法，(岩波現代応用数学講座)

2) 宇野利雄：数値解析 (朝倉書店)

3) 古屋　茂：行列および行列式 (培風館)

(昭和39年6月12日受付)