B-2. 勾配法

代表：CG(Conjugate Gradient、共役勾配)法

大規模・疎行列で使用

多くの場合、古典的反復法（SOR,etc..)より高速

<u>連立方程式（行列方程式）</u>

$$\mathbf{Af} = \mathbf{b}$$

係数行列**A**: 対称　$\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$

正定値　$\mathbf{x}^T\mathbf{Ax} > 0$　$\mathbf{x}$：任意のベクトル

B-2. 勾配法

基本コンセプト

方程式の２乗誤差 $S=\sum_{i=1}^{N}\left(b_i-(\mathbf{Af})_i\right)^2=(\mathbf{b}-\mathbf{Af})\bullet(\mathbf{b}-\mathbf{Af})$

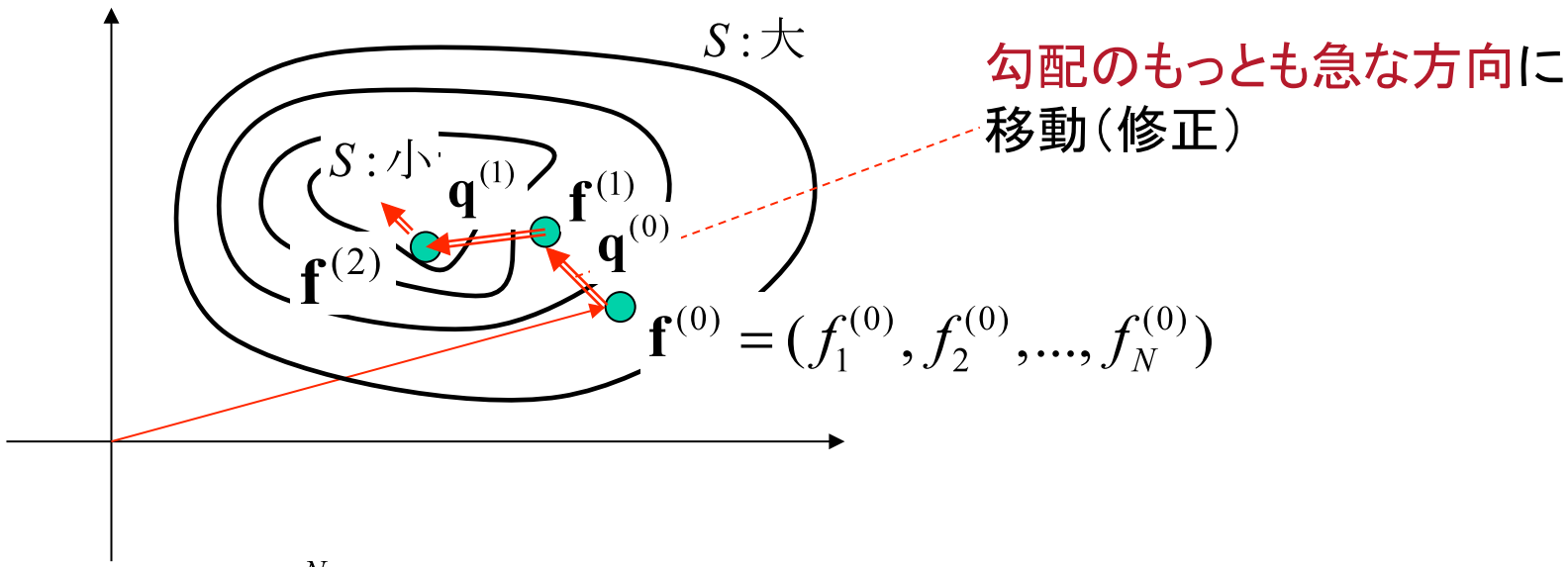
を最小とするように $\mathbf{f}=(f_1,f_2,\ldots,f_N)$を決定する。

係数行列**A**: 対称
正定値

S 最小 → $(\mathbf{b}-\mathbf{Af})=0$ を満たす。

B-2. 勾配法

<u>解ベクトル空間</u> $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_N)$



$$S = \sum_{i=1}^{N} \left(b_i - (\mathbf{Af})_i \right)^2 = (\mathbf{b} - \mathbf{Af}) \bullet (\mathbf{b} - \mathbf{Af})$$

山で道に迷って、谷底に行こうとするのと同じ。

B-2. 勾配法

<u>CG法の計算手順:</u>

Step1: 初期値 $\mathbf{f}^{(0)} = \left(f_1^{(0)}, f_2^{(0)}, \ldots, f_N^{(0)}\right)$ から、最初の修正量の方向

$$\mathbf{q}^{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{f}^{(0)}$$

を求める。

Step2:αを修正する距離として、$\mathbf{q}^{(0)}$により修正された解ベクトル

$$\mathbf{f}^{(n+1)} = \mathbf{f}^{(n)} + \alpha \mathbf{q}^{(n)}$$

のSが最小値になるようにαを決定する。

$$\alpha = \frac{\mathbf{q}^{(n)} \bullet \mathbf{r}^{(n)}}{\mathbf{q}^{(n)} \bullet \left(\mathbf{A}\mathbf{q}^{(n)}\right)}$$

$$\mathbf{r}^{(n)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{f}^{(n)}$$

残差ベクトル

B-2. 勾配法

<u>CG法の計算手順:</u>

Step3: 次の修正量の方向 $\mathbf{q}^{(n+1)}$ を決定する。

$$\mathbf{q}^{(n+1)} = \mathbf{r}^{(n+1)} + \beta \mathbf{q}^{(n)}$$

として、次の修正後の解の残差ベクトル

$$\mathbf{r}^{(n+2)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{f}^{(n+2)}$$

がそれ以前の残差ベクトル $\mathbf{r}^{(l)} = \mathbf{r}^{(0)}, \mathbf{r}^{(1)}, \ldots, \mathbf{r}^{(n+1)}$
と直交するように決める

$$\beta = -\frac{\mathbf{r}^{(n+1)} \bullet \left(\mathbf{A}\mathbf{q}^{(n)}\right)}{\mathbf{q}^{(n)} \bullet \left(\mathbf{A}\mathbf{q}^{(n)}\right)}$$

B-2. 勾配法

CG法の計算手順:

Step4: 収束判定を行い、未収束ならばStep2にn⇒n+1として戻る

CG(勾配)法の特徴:

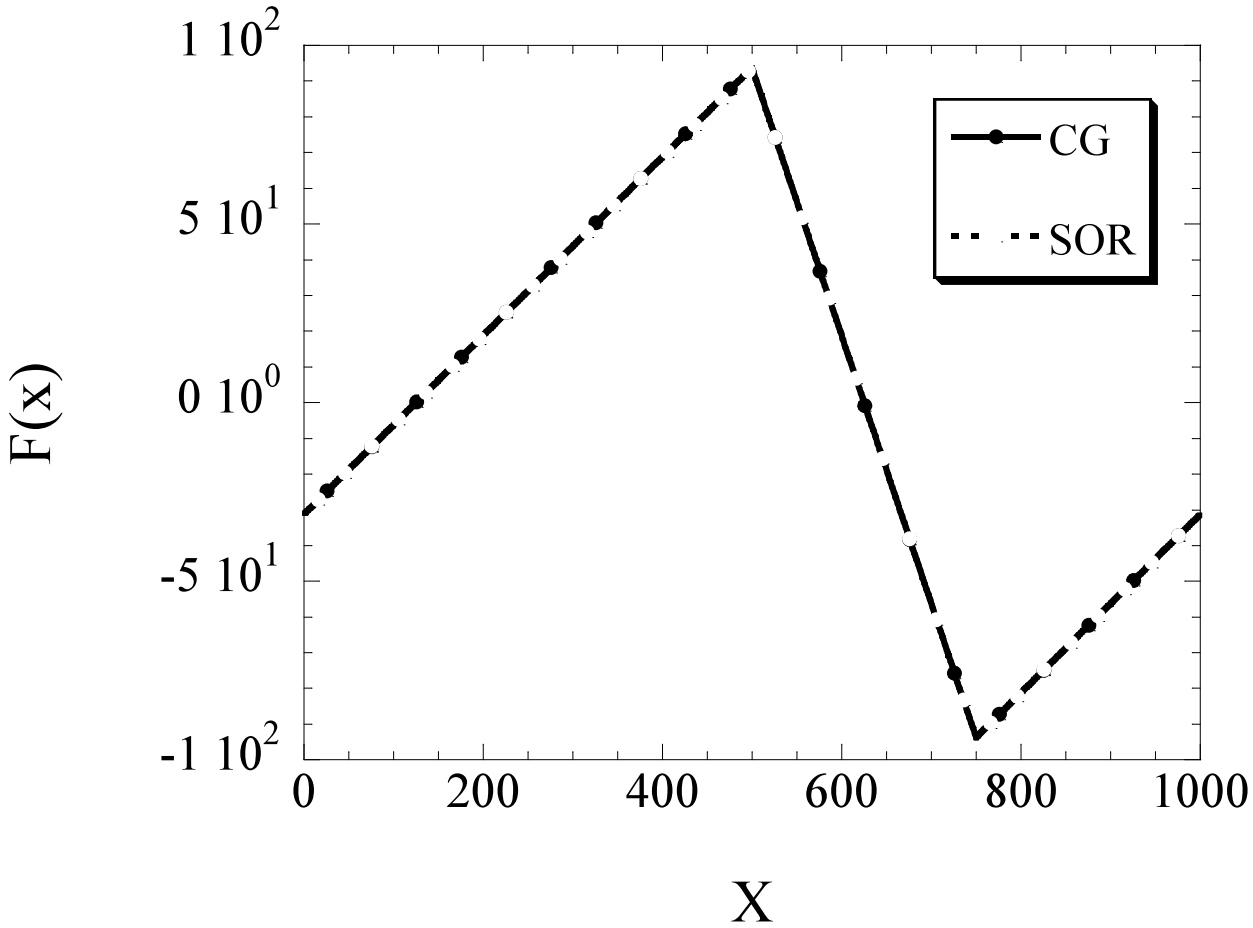
- N格子点数⇒N回の反復計算で厳密解に到達する
- 修正・残差ベクトル $\mathbf{q}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)}$の保存用のメモリが必要
- １反復に関わる計算数は多
- 非対称行列には不向き⇒GCNR,BiCGstab法等で可
- 疎行列以外ではメモリー面で不利

楕円形方程式解法—CG法

メッシュ数Nxの増加に対して、必要精度を得るためには、

CG法：反復回数∝Nx　（最適ωを探索する必要なし）

$$\frac{d}{dx^2} f(x) = -\delta(x-500) + \delta(x-750)$$



ε=10E-8

Itr. Num.

SOR: 3,559

CG:　376