数理解析研究所講究録 1265 巻 2002 年 129-139

特異な系に対する GCR(k) 法の収束性について

速水　謙 (Ken Hayami)
国立情報学研究所 (National Institute of Informatics)

1　はじめに

A を $n \times n$ の特異な実行列, $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^n$ とする. このとき, 連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \tag{1.1}$$

あるいはより一般的には, 最小二乗問題 $\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$ を考える.

これらは, 例えば流体解析などで生じる偏微分方程式に全周ノイマン条件を課し, 有限差分法や有限要素法で離散化する際, 辺要素を用いた有限要素法による電磁界解析, 有限要素法で冗長な内挿関数を用いる場合 [6], マルコフ連鎖の定常確率状態ベクトルを求めるときなどに生じる. また, Jacobi-Davidson 法 [5] で固有値問題を解く際の修正方程式も特異である.

このような特異な系をクリロフ部分空間法を用いて解くことを考える. その中でも双直交性に基づいた手法は発散する場合があり, 収束を保証するには系に修正を施す必要がある. 一方, GCR(k) 法 (一般化共役残差法)[2] や GMRES(k) 法 [4] のように残差の最小化に基づいた方法では, その原理からして, そのような修正を行わないでも残差が単調に減少することが期待される [1].

そこで, 本論文では特異な系に対して GCR(k) 法が破綻なく収束するための必要十分条件について論じる.

なお, 本論文では以下の記号を用いる.

$\langle \boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_m \rangle$: ベクトル $\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_m$ によって張られる部分空間.

$V^\perp$: $\mathbf{R}^n$ の部分空間 V の直交補空間.

$V \oplus W$: 部分空間 V と部分空間 W の直和.

また, 任意の n 次の実正方行列 X に対して,

$R(X)$: 行列 X の像空間, つまり X の列ベクトルの張る部分空間,

$\ker X$: 行列 X の零空間, つまり, $X\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$ となるベクトル $\boldsymbol{v} \in \mathbf{R}^n$ の成す部分空間,

$M(X) := \dfrac{X + X^{\mathrm{T}}}{2}$: 行列 X の対称部,

$\lambda_{\min}(X)$: 行列 X の固有値のうち絶対値が最小となる固有値,

$\lambda_{\min}^{+}(X)$: 行列 X の 0 ではない固有値のうち絶対値が最小となる固有値,

$\lambda_{\max}(X)$: 行列 X の固有値のうち絶対値が最大となる固有値,

2 正則な系に対する GCR(k) 法とその収束性

まず, 正則な系に対する GCR(k) 法のアルゴリズムとその収束性 [2] について述べる.

(対称とは限らない) $n \times n$ の正則な実行列 A を係数行列, $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^n$ を右辺, $\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$ を解とする連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{2.1}$$

に対して, GCR(k) 法のアルゴリズムは次のように与えられる.

GCR(k) 法のアルゴリズム

Choose $\boldsymbol{x}_0$

$*$ $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$

$\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0$

For $i = 0, 1, \ldots, k$ until the residual ($\boldsymbol{r}$) converges, do

begin

$$\alpha_i = \frac{(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_i)}{(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i)}$$

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i \boldsymbol{p}_i$$

$$\boldsymbol{r}_{i+1} = \boldsymbol{r}_i - \alpha_i A\boldsymbol{p}_i$$

$$\beta_j^i = -\frac{(A\boldsymbol{r}_{i+1}, A\boldsymbol{p}_j)}{(A\boldsymbol{p}_j, A\boldsymbol{p}_j)} \quad (0 \le j \le i)$$

$$\boldsymbol{p}_{i+1} = \boldsymbol{r}_{i+1} + \sum_{j=0}^{i} \beta_j^i \boldsymbol{p}_j$$

end

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_{k+1}$

Go to $*$.

(2.2)

まず, 次の補題に注意する.

補題 2.1 行列 A の対称部 $M(A)$ が定値ならば行列 A は正則である. □

さて, 係数行列 A が正則なとき, GCR(k) 法の残差ベクトルが $\boldsymbol{0}$ に収束するための十分条件は, 次の定理で与えられる [2, 3].

定理 2.2 係数行列 A の対称部 $M(A)$ が定値であるならば, 次のいずれかが成り立つ.

1. ある $l \ge 0$ が存在して, $\boldsymbol{p}_i \neq \boldsymbol{0}$ $(0 \le i < l)$, $\boldsymbol{r}_l = \boldsymbol{0}$ となる. さらに, $0 \le i < l$ に対して

$$\frac{\|\boldsymbol{r}_{i+1}\|_2{}^2}{\|\boldsymbol{r}_i\|_2{}^2} \le 1 - \frac{\{\lambda_{\min}(M(A))\}^2}{\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}}A)} \tag{2.3}$$

が成り立つ.

2. 全ての $i \ge 0$ に対して $\boldsymbol{p}_i \neq \boldsymbol{0}$, かつ $\boldsymbol{r}_i \neq \boldsymbol{0}$ であって, 式 (2.3) が成り立つ. □

ところで, 次の補題が成り立つ.

補題 2.3 $M(A) := \dfrac{A+A^{\mathrm{T}}}{2}$ が定値でない $\Longrightarrow$ $^{\exists}\boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}\,;\ (\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}) = 0.$ □

この補題を用いると, GCR(k) 法が破綻することなく収束するための必要十分条件を与える次の定理が導かれる [1]. ただし, 「破綻」とは「GCR(k) 法のアルゴリズムにおけるパラメータ α_i の分母 $(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i)$ が 0 となり, 計算が続行できなくなること」である.

定理 2.4 係数行列 A が正則であるとき, (1)–(3) は同値である.

(1) 任意の右辺項 $\boldsymbol{b}$ および初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, GCR(k) 法は破綻せず, かつ収束する.

(2) 任意の右辺項 $\boldsymbol{b}$ および初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, GCR(k) 法は破綻しない.

(3) 係数行列 A の対称部 $M(A)$ が定値である. □

3 特異な系に対する GCR(k) 法の収束性

次に, 連立一次方程式 (2.1) の一般化として, 正則とは限らない $n \times n$ 行列 A と, $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^n$ に対する最小 2 乗問題

(3.1)
$$\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$$

に対する GCR(k) 法の収束性を考える. ただし, 以下では $\mathrm{rank}A = \dim R(A) = r > 0$ とする.

文献 [1] に従い,

$\boldsymbol{q}_1, \cdots, \boldsymbol{q}_r : R(A)$ の正規直交基底,

$\boldsymbol{q}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{q}_n : R(A)^{\perp}$ の正規直交基底

とおき,

$Q_1 := [\,\boldsymbol{q}_1, \cdots, \boldsymbol{q}_r] : n \times r$ 行列,

$Q_2 := [\,\boldsymbol{q}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{q}_n] : n \times (n-r)$ 行列,

$Q := [\,Q_1, Q_2] : n \times n$ の直交行列,

従って $Q^{\mathrm{T}}Q = QQ^{\mathrm{T}} = \mathrm{I}_n$ (I_n は n 次の単位行列),

(3.2)

とすると,

$$Q^{\mathrm{T}}AQ = \begin{bmatrix} {Q_1}^{\mathrm{T}}AQ_1 & {Q_1}^{\mathrm{T}}AQ_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

を得る.

このとき, 以下が成り立つ.

定理 3.1 $A_{11} = Q_1{}^{\mathrm{T}} A Q_1$: 正則 $\Longleftrightarrow$ $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$. □

定理 3.2 $A_{12} = Q_1{}^{\mathrm{T}} A Q_2 = 0 \Longleftrightarrow R(A)^{\perp} = \ker A$. □

系 3.3 $R(A)^{\perp} = \ker A \Longrightarrow A_{11}$: 正則 . □

3.1 GCR(k) 法の $R(A), \ker A$ への分離

従って, 条件「$R(A)^{\perp} = \ker A$」が成り立つときに限り,

$$\tilde{A} = Q^{\mathrm{T}} A Q = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

となり, そのとき $A_{11} = Q_1{}^{\mathrm{T}} A Q_1$ は正則である.

そこで, 以下ではこの条件のもとで, [1] と同様にして GCR(k) 法のアルゴリズムが部分空間 $R(A)$ とその直交補空間 $R(A)^{\perp} = \ker A$ に分離可能であることを示す. そして, GCR(k) 法の残差の収束性が分離された GCR(k) 法における $R(A)$ 成分の残差の収束性と一致することを示す. さらに, $R(A)$ 成分に関する GCR(k) 法の収束定理を導く.

式 (3.2) のようにおくと, (2.2) の GCR(k) 法のアルゴリズムで用いられているベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{r}$ (添え字は省略) は, 以下のように $R(A)$ の成分 (より正確には, $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_r$ で展開して得られる成分. $\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{p}^1, \boldsymbol{b}^1, \boldsymbol{r}^1$ で表す.) と $R(A)^{\perp} = \ker A$ の成分 (より正確には, $\boldsymbol{q}_{r+1}, \boldsymbol{q}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{q}_n$ で展開して得られる成分. $\boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{p}^2, \boldsymbol{b}^2, \boldsymbol{r}^2$ で表す.) とに分離される.

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} Q_1{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} \\ Q_2{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^1 \\ \boldsymbol{x}^2 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{p}} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p} = \begin{bmatrix} Q_1{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p} \\ Q_2{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}^1 \\ \boldsymbol{p}^2 \end{bmatrix}. \tag{3.4}$$

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} Q_1{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} \\ Q_2{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^1 \\ \boldsymbol{b}^2 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{r}} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r} = \begin{bmatrix} Q_1{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r} \\ Q_2{}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^1 \\ \boldsymbol{r}^2 \end{bmatrix}. \tag{3.5}$$

さて, 式 (3.3),(3.4),(3.5) および

$$(\boldsymbol{r}, A\boldsymbol{p}) = (Q\tilde{\boldsymbol{r}}, AQ\tilde{\boldsymbol{p}}) = \tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{T}} Q^{\mathrm{T}} A Q \tilde{\boldsymbol{p}} = (\boldsymbol{r}^1, A_{11} \boldsymbol{p}^1),$$

$$(A\boldsymbol{p}, A\boldsymbol{p}) = (AQ\tilde{\boldsymbol{p}}, AQ\tilde{\boldsymbol{p}}) = \tilde{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}} Q^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A Q \tilde{\boldsymbol{p}} = \tilde{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}} Q^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} Q Q^{\mathrm{T}} A Q \tilde{\boldsymbol{p}} = (\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}) = (A_{11}\boldsymbol{p}^1, A_{11}\boldsymbol{p}^1),$$

$$(A\boldsymbol{r}, A\boldsymbol{p}) = (AQ\tilde{\boldsymbol{r}}, AQ\tilde{\boldsymbol{p}}) = \tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{T}} Q^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} Q Q^{\mathrm{T}} A Q \tilde{\boldsymbol{p}} = (\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{r}}, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}) = (A_{11}\boldsymbol{r}^1, A_{11}\boldsymbol{p}^1)$$

などより, 条件: $R(A)^{\perp} = \ker A$ のもとで $R(A)$ 成分と $\ker A$ 成分に分離された GCR(k) 法のアルゴリズムは次のようになる.

分離された GCR(k) 法のアルゴリズム

Choose $\boldsymbol{x}_0$.

$R(A)$ component	$\ker A$ component
$\boldsymbol{b}^1 = {Q_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{b}^2 = {Q_2}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$
$\boldsymbol{x}_0^1 = {Q_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$	$\boldsymbol{x}_0^2 = {Q_2}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$
$*\ \ \boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - A_{11}\boldsymbol{x}_0^1$	$\boldsymbol{r}_0^2 = \boldsymbol{b}^2$
$\boldsymbol{p}_0^1 = \boldsymbol{r}_0^1$	$\boldsymbol{p}_0^2 = \boldsymbol{b}^2$

For $i = 0, 1, \ldots$ until $\boldsymbol{r}^1$ (the $R(A)$ component of the residual $\boldsymbol{r}$) converges, do

begin

$$\alpha_i = \frac{(\boldsymbol{r}_i^1,\ A_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}{(A_{11}\boldsymbol{p}_i^1,\ A_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}$$

$$\boldsymbol{x}_{i+1}^1 = \boldsymbol{x}_i^1 + \alpha_i\boldsymbol{p}_i^1 \qquad \boldsymbol{x}_{i+1}^2 = \boldsymbol{x}_i^2 + \alpha_i\boldsymbol{p}_i^2$$

$$\boldsymbol{r}_{i+1}^1 = \boldsymbol{r}_i^1 - \alpha_i A_{11}\boldsymbol{p}_i^1 \qquad \boldsymbol{r}_{i+1}^2 = \boldsymbol{b}^2$$

$$\beta_i^j = -\frac{(A_{11}\boldsymbol{r}_{i+1}^1,\ A_{11}\boldsymbol{p}_j^1)}{(A_{11}\boldsymbol{p}_j^1,\ A_{11}\boldsymbol{p}_j^1)} \quad (0 \le j \le i)$$

$$\boldsymbol{p}_{i+1}^1 = \boldsymbol{r}_{i+1}^1 + \sum_{j=0}^{i}\beta_j^i\boldsymbol{p}_j^1 \qquad \boldsymbol{p}_{i+1}^2 = \boldsymbol{b}^2 + \sum_{j=0}^{i}\beta_j^i\boldsymbol{p}_j^2$$

end

$$\boldsymbol{x}_0^1 = \boldsymbol{x}_{k+1}^1 \qquad \boldsymbol{x}_0^2 = \boldsymbol{x}_{k+1}^2$$

Go to $*$.

(3.6)

上記のアルゴリズムの内, $R(A)$ 成分に関する部分は, 連立一次方程式

$$A_{11}\boldsymbol{x}^1 = \boldsymbol{b}^1 \tag{3.7}$$

に適用した GCR(k) 法と解釈できる. (定理 3.1より, 条件: $R(A)^{\perp} = \ker A$ のもとでは行列 A_{11} は正則であることに注意.) 一方, $\ker A$ 成分の残差ベクトル $\boldsymbol{r}_i^2$ は常に式 (3.1) の最小 2 乗残差 $\boldsymbol{b}^2$ に等しい. 従って, 分離された GCR(k) 法のアルゴリズム (3.6) の残差の収束性は, 式 (3.7) に対する GCR(k) 法のアルゴリズムにおける残差 $\boldsymbol{r}^1$ の収束性と一致する. よって, 定理 2.2より, 分離された GCR(k) 法の収束性に関して次の補題を得る.

補題 3.4 係数行列 $A_{11} = {Q_1}^{\mathrm{T}}AQ_1$ の対称部 $M(A_{11})$ が定値であるとき, 次のいずれかが成り立つ.

1. ある $l \ge 0$ が存在して, $\boldsymbol{p}_i^1 \ne 0\,(0 \le i < l)$, $\boldsymbol{r}_l^1 = 0$ となる. さらに, $0 \le i < l$ に対して

$$\frac{{\|\boldsymbol{r}_{i+1}^1\|_2}^2}{{\|\boldsymbol{r}_i^1\|_2}^2} \le 1 - \frac{\{\lambda_{\min}(M(A_{11}))\}^2}{\lambda_{\max}(A_{11}^{\mathrm{T}}A_{11})} \tag{3.8}$$

が成り立つ.

2. 全ての $i \geq 0$ に対して $\boldsymbol{p}_i^1 \neq \boldsymbol{0}$, かつ $\boldsymbol{r}_i^1 \neq \boldsymbol{0}$ であって, 式 (3.8) が成り立つ. □

3.2 $R(A)^{\perp} = \ker A$ の場合の収束定理

次に, [1] と同様にして, 補題 3.4を特異な系に対する GCR(k) 法の収束定理へ拡張する. そのためにまず以下の補題に注意する.

補題 3.5 $R(A)^{\perp} = \ker A$ なら, $\boldsymbol{v}^1 := {Q_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \Longleftrightarrow A\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$. □

補題 3.6 $R(A)^{\perp} = \ker A$ かつ $M(A_{11})$ が正則なら, $\lambda_{\min}(M(A_{11})) = \lambda_{\min}^{+}(M(A))$. □

補題 3.7 $R(A)^{\perp} = \ker A$ のとき,
$M(A_{11})$: 定値 $\Longleftrightarrow$ 「$M(A)$: 半定値, $\mathrm{rank}\, M(A) = \mathrm{rank} A$」. □

補題 3.8 $R(A)^{\perp} = \ker A$ なら, $\lambda_{\max}({A_{11}}^{\mathrm{T}} A_{11}) = \lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}} A)$. □

すると,

$$\|\boldsymbol{r}^1\|_2{}^2 = \|\boldsymbol{r}\|_2{}^2 - \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2{}^2$$

及び補題 3.4,3.5,3.6,3.8より, 特異な係数行列に適用した GCR(k) 法に関する次の収束定理を得る.

定理 3.9 $R(A)^{\perp} = \ker A$ かつ $A_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1$ の対称部 $M(A_{11})$ が定値のとき, 次のいずれかが成り立つ.

1. ある $l \geq 0$ が存在して, $A\boldsymbol{p}_i \neq \boldsymbol{0}\,(0 \leq i < l)$, $A\boldsymbol{r}_l = \boldsymbol{0}$ となる. これは, 最小 2 乗解が得られていることを意味する. さらに, $0 \leq i < l$ に対して

$$\frac{\|\boldsymbol{r}_{i+1}\|_2{}^2 - \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2{}^2}{\|\boldsymbol{r}_i\|_2{}^2 - \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2{}^2} \leq 1 - \frac{\{\lambda_{\min}^{+}(M(A))\}^2}{\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}} A)} \tag{3.9}$$

が成り立つ.

2. 全ての $i \geq 0$ に対して $A\boldsymbol{p}_i \neq \boldsymbol{0}$, かつ $A\boldsymbol{r}_i \neq \boldsymbol{0}$ であって, 式 (3.9) が成り立つ. □

さらに, 補題 2.3に注意すると, 定理 3.9を利用して, 一般の実正方行列 A に関して, 任意の右辺 $\boldsymbol{b}$ および初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して GCR(k) 法が破綻することなく収束するための必要十分条件に関する次の定理を得る.

定理 3.10 以下の (1)–(5) は同値である.

(1) 任意の右辺項 $\boldsymbol{b}$ および初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して,
GCR(k) 法は破綻せず, かつ残差の $R(A)$ 成分が 0 に収束する.

(2) 任意の右辺項 $\boldsymbol{b}$ および初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, GCR(k) 法は破綻しない.

(3) $A_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1$ の対称部 $M(A_{11})$ が定値, かつ $R(A)^{\perp} = \ker A$ である.

(4) A の対称部 $M(A)$ が $R(A)$ において定値, かつ $R(A)^{\perp} = \ker A$ である.

(5) $M(A)$ が半定値, かつ $\mathrm{rank}\, M(A) = \mathrm{rank} A$, かつ $R(A)^{\perp} = \ker A$ である. □

なお, 上記で GCR 法 ($k = \infty$ の場合) が収束する場合は $r(= \mathrm{rank}A)$ 回以内で収束する.

また, 上記で (3) と (4) が同値なのは, $(\boldsymbol{x}, M(A_{11})\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, A_{11}\boldsymbol{x}) = (Q_1\boldsymbol{x}, AQ_1\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{y}, A\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y}, M(A)\boldsymbol{y})$, $\boldsymbol{y} := Q_1\boldsymbol{x} \in R(A)$ による.

最後に, GCR(k) 法が収束する際の近似解の収束先について次の定理が成り立つ.

定理 3.11 $R(A)^{\perp} = \ker A$ のとき, GCR(k) 法で残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束するとき (最小二乗解), 近似解 $\boldsymbol{x}_i$ の $R(A)$ 成分 $\boldsymbol{x}_i^1$ は ${A_{11}}^{-1}\boldsymbol{b}^1$ に収束する.

さらに, $\boldsymbol{b} \in R(A)$ ならば $\boldsymbol{x}_i$ の $\ker A$ 成分 $\boldsymbol{x}_i^2$ はつねに $\boldsymbol{x}_0^2$ に等しい. そのとき, 近似解 $\boldsymbol{x}_i$ は $Q_1{A_{11}}^{-1}Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} + Q_2Q_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$ に収束する.

さらに, $\boldsymbol{x}_0$ の $\ker A$ 成分 $\boldsymbol{x}_0^2 = \mathbf{0}$ (つまり $\boldsymbol{x}_0 \in R(A)$) ならば, $\boldsymbol{x}_i$ はノルム最小の最小二乗解 (擬逆解) $Q_1A_{11}^{-1}Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ に収束する.

(ただし, $A_{11} := Q_1^{\mathrm{T}}AQ_1$, $\boldsymbol{b}^1 := Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x}_0^2 := Q_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$ で, $\boldsymbol{x}_0$ は初期解である.) □

従って, $R(A)^{\perp} = \ker A$ かつ $M(A_{11})$ が定値かつ $\boldsymbol{b} \in R(A)$ のときは, 初期解を例えば $\boldsymbol{x}_0 = \mathbf{0}$ とおけば, GCR(k) 法による近似解は擬逆解に収束する.

3.3 $R(A)^{\perp} \neq \ker A$ の場合の収束定理

次に $R(A)^{\perp} \neq \ker A$ の場合を考える. このときは, 定理 3.2より, 変換 $Q^{\mathrm{T}}AQ$ を用いても $A_{12} = 0$ とならないので, 変換 $Q^{\mathrm{T}}AQ$ を用いても GCR(k) 法を $R(A)$ 成分と $R(A)^{\perp}$ 成分に分離することはできない.

そこで, $R(A)^{\perp} = \ker A$ とは限らない一般の場合は, $Q = [Q_1, Q_2]$ の他に

$\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_r : (\ker A)^{\perp}$ の正規直交基底,

$\boldsymbol{u}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{u}_n : \ker A$ の正規直交基底,

$U_1 := [\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_r] : n \times r$ 行列,

$U_2 := [\boldsymbol{u}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{u}_n] : n \times (n-r)$ 行列,

$U := [U_1, U_2] : n \times n$ の直交行列

とおく. (次元定理より $\dim(\ker A)^{\perp} = \dim R(A) = r$ に注意.)

すると, 以下の補題が成り立つ.

補題 3.12

$$\tilde{A}' := Q^{\mathrm{T}}AU = \begin{bmatrix} {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

□

補題 3.13 $A'_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_1$ は $r \times r$ の正則行列である. □

補題 3.14 ${U_1}^{\mathrm{T}}Q_1$: 正則 $\iff R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$. □

そこで, (2.2) の GCR(k) 法のアルゴリズムで用いられているベクトル $\boldsymbol{b}, \boldsymbol{r}$ は, (3.5) のように $R(A)$ の成分と $R(A)^\perp$ の成分とに分離する. 一方, $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}$ は

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = U^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} U_1{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\ U_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^1 \\ \boldsymbol{x}^2 \end{bmatrix}, \qquad \tilde{\boldsymbol{p}} = U^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p} = \begin{bmatrix} U_1{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p} \\ U_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}^1 \\ \boldsymbol{p}^2 \end{bmatrix}.$$

(3.10)

のように $(\ker A)^\perp$ の成分 ($\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_r$ で展開して得られる成分 $\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{p}^1$) と $\ker A$ の成分 ($\boldsymbol{u}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{u}_n$ で展開して得られる成分 $\boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{p}^2$) とに分離する.

すると,

$$Q^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x} = Q^{\mathrm{T}}AUU^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} A'_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^1 \\ \boldsymbol{x}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A'_{11}\boldsymbol{x}^1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

を得る.

変換 (3.5),(3.10) を (2.2) の GCR(k) 法のアルゴリズムに適用する. その際,

$$\boldsymbol{p}_{i+1} = \boldsymbol{r}_{i+1} + \beta_i\boldsymbol{p}_i \Longleftrightarrow \tilde{\boldsymbol{p}}_{i+1} = U^{\mathrm{T}}Q\tilde{\boldsymbol{r}}_{i+1} + \beta_i\tilde{\boldsymbol{p}}_i,$$

$$(\boldsymbol{r}, A\boldsymbol{p}) = (Q\tilde{\boldsymbol{r}}, AU\tilde{\boldsymbol{p}}) = (\tilde{\boldsymbol{r}}, Q^{\mathrm{T}}AU\tilde{\boldsymbol{p}}) = (\tilde{\boldsymbol{r}}, \tilde{A}'\tilde{\boldsymbol{p}}) = (\boldsymbol{r}^1, A'_{11}\boldsymbol{p}^1),$$

$$(A\boldsymbol{p}, A\boldsymbol{p}) = (Q^{\mathrm{T}}AU\tilde{\boldsymbol{p}}, Q^{\mathrm{T}}AU\tilde{\boldsymbol{p}}) = (\tilde{A}'\tilde{\boldsymbol{p}}, \tilde{A}'\tilde{\boldsymbol{p}}) = (A'_{11}\boldsymbol{p}^1, A'_{11}\boldsymbol{p}^1),$$

$$(A\boldsymbol{r}, A\boldsymbol{p}) = (Q\tilde{A}'U^{\mathrm{T}}Q\tilde{\boldsymbol{r}}, Q\tilde{A}'\tilde{\boldsymbol{p}}) = (\tilde{A}'U^{\mathrm{T}}Q\tilde{\boldsymbol{r}}, \tilde{A}'\tilde{\boldsymbol{p}}) = (A'_{11}U_1^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2), A'_{11}\boldsymbol{p}^1)$$

などに注意すると GCR(k) 法を以下のように部分的に分離することができる.

部分的に分離された GCR(k) 法のアルゴリズム

($R(A)^\perp \neq \ker A$ も含めた一般の場合)

Choose initial approximate solution $\boldsymbol{x}_0$.

$\boldsymbol{b}^1 = Q_1{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ $\quad$ $\boldsymbol{b}^2 = Q_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$

$\boldsymbol{x}_0^1 = U_1{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$ $\quad$ $\boldsymbol{x}_0^2 = U_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$

$* \ \boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - A'_{11}\boldsymbol{x}_0^1$ $\quad$ $\boldsymbol{r}_0^2 = \boldsymbol{b}^2$

$\boldsymbol{p}_0^1 = U_1{}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_0^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2)$ $\quad$ $\boldsymbol{p}_0^2 = U_2{}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_0^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2)$

For $i = 0, 1, \ldots$ until $\boldsymbol{r}^1$ ($R(A)$ – component of residual) converges, do

begin

$$\alpha_i = \frac{(\boldsymbol{r}_i^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}{(A'_{11}\boldsymbol{p}_i^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}$$

$\boldsymbol{x}_{i+1}^1 = \boldsymbol{x}_i^1 + \alpha_i\boldsymbol{p}_i^1$ $\quad$ $\boldsymbol{x}_{i+1}^2 = \boldsymbol{x}_i^2 + \alpha_i\boldsymbol{p}_i^2$

$\boldsymbol{r}_{i+1}^1 = \boldsymbol{r}_i^1 - \alpha_i A'_{11}\boldsymbol{p}_i^1$ $\quad$ $\boldsymbol{r}_{i+1}^2 = \boldsymbol{b}^2$

$$\beta_i^j = -\frac{(A'_{11}U_1{}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_{i+1}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2), A'_{11}\boldsymbol{p}_j^1)}{(A'_{11}\boldsymbol{p}_j^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_j^1)} \qquad (0 \leq j \leq i)$$

$\boldsymbol{p}_{i+1}^1 = U_1{}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_{i+1}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2) + \sum_{j=0}^{i}\beta_j^i\boldsymbol{p}_j^1$ $\qquad$ $\boldsymbol{p}_{i+1}^2 = U_2{}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_{i+1}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2) + \sum_{j=0}^{i}\beta_j^i\boldsymbol{p}_j^2$

end

$\boldsymbol{x}_0^1 = \boldsymbol{x}_{k+1}^1$ $\qquad$ $\boldsymbol{x}_0^2 = \boldsymbol{x}_{k+1}^2$

Go to $*$.

(3.11)

上記のアルゴリズムの左側の成分に着目すると, β_j^i や $\boldsymbol{p}_{i+1}^1$ の計算で $\boldsymbol{b}^2$ を含む項があるため, アルゴリズムが複雑になり, 分離が完全でない. そこで, $\boldsymbol{b}^2 = Q_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$, つまり $\boldsymbol{b} \in R(A)$ となり右辺項が像空間に含まれる場合を考える.

さらに, 分離されたアルゴリズムの収束性を議論するために, 上記のアルゴリズムの左側の成分だけを取り出し, 簡単のため $A := A'_{11} = Q_1{}^{\mathrm{T}}AU_1$, $B := U_1{}^{\mathrm{T}}Q_1 \in \mathbf{R}^{r\times r}$ 及び $\boldsymbol{x} := \boldsymbol{x}^1$, $\boldsymbol{p} := \boldsymbol{p}^1$, $\boldsymbol{b} := \boldsymbol{b}^1$, $\boldsymbol{r} := \boldsymbol{r}^1 \in \mathbf{R}^r$ とおくと以下の補題を得る.

補題 3.15

$$\frac{\|\boldsymbol{r}_{i+1}\|_2{}^2}{\|\boldsymbol{r}_i\|_2{}^2} \leq 1 - \left\{\frac{(\boldsymbol{r}_i, C\boldsymbol{r}_i)}{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)}\right\}^2 \frac{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)}{(C\boldsymbol{r}_i, C\boldsymbol{r}_i)}$$

が成り立つ. ただし, $C := AB$ である. □

補題 3.16

$$\frac{\|\boldsymbol{r}_{i+1}\|_2{}^2}{\|\boldsymbol{r}_i\|_2{}^2} \leq 1 - \frac{\lambda_{\min}(M)^2}{\lambda_{\max}(C^{\mathrm{T}}C)}.$$

ただし, $M := \dfrac{C + C^{\mathrm{T}}}{2}$ である. □

以上より次の収束定理を得る. ($M(C)$ が定値 $\Longrightarrow C$: 正則 $\Longrightarrow B$: 正則 $\Longleftrightarrow R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$ に注意.)

定理 3.17 $M(C)$ が定値かつ $\boldsymbol{b} \in R(A)$ ならば, 部分的に分離された GCR(k) 法のアルゴリズム (3.11) において次のいずれかが成り立つ.

1. ある $l \geq 0$ が存在して, $\boldsymbol{p}_i^1 \neq \boldsymbol{0}\,(0 \leq i < l)$, $\boldsymbol{r}_l^1 = \boldsymbol{0}$ となる. さらに, $0 \leq i < l$ に対して

   (3.12) $$\frac{\|\boldsymbol{r}_{i+1}^1\|_2{}^2}{\|\boldsymbol{r}_i^1\|_2{}^2} \leq 1 - \frac{\{\lambda_{\min}(M(C))\}^2}{\lambda_{\max}(C^{\mathrm{T}}C)}$$

   が成り立つ.

2. 全ての $i \geq 0$ に対して $\boldsymbol{p}_i^1 \neq \boldsymbol{0}$, かつ $\boldsymbol{r}_i^1 \neq \boldsymbol{0}$ であって, 式 (3.12) が成り立つ. □

最後に, 特異な系に対する次の収束定理を得る.

定理 3.18 $\boldsymbol{b} \in R(A)$ のとき, (1)–(3) は同値である.

(1) 任意の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, GCR 法 (k) は破綻せず,
　　かつ残差の $R(A)$ 成分が 0 に収束する.

(2) 任意の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, GCR(k) 法は破綻しない.

(3) $M(C)$ が定値である.

(4) $M(A_{11})$ が定値である.

(5) $M(A)$ が $R(A)$ において定値である. □

なお, GCR 法は破綻しなければ多くとも $r = \mathrm{rank}A$ 回の反復で収束する.

また, $\boldsymbol{b} \in R(A)$ の場合で, GCR(k) 法により残差の $R(A)$ 成分が 0 に収束する場合は, 部分的に分離された GCR(k) 法のアルゴリズム (3.11) および定理3.17, 3.18からもわかるように, 近似解の $(\ker A)^{\perp}$ 成分 $\boldsymbol{x}_i^1$ は ${A'_{11}}^{-1}\boldsymbol{b}^1$ に収束する.

上記で (3),(4),(5) が同値なのは, $(\boldsymbol{x}, M(C)\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, C\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}C\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}Q_1^{\mathrm{T}}AU_1U_1^{\mathrm{T}}Q_1\boldsymbol{x}$ $(Q_1\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}A(I - U_2U_2^{\mathrm{T}})Q_1\boldsymbol{x} = (Q_1\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}AQ_1\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}, A_{11}\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, M(A_{11})\boldsymbol{x}) = (Q_1\boldsymbol{x}, AQ_1\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{y}, A\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y}, M(A)\boldsymbol{y})$ $\boldsymbol{y} := Q_1\boldsymbol{x} \in R(A)$ による.

3.4 例

最後に, 文献 [1] に挙げられた例について GCR(k) 法の収束性をを改めて分析する. 常微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2} + \beta\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = f(x) \qquad (0 < x < 1)$$

に対して, 周期境界条件: $u(0) = u(1)$, または, Neumann 境界条件: $\left.\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right|_{x=1} = 0$ を施した二点境界値問題を考える. これらの問題の離散近似として, 区間 [0,1] を $(n-1)$ 等分し, 微分を中心差分で近似して得られる連立一次方程式 $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$ を考える.

周期境界条件の場合は, 境界条件を $u_0 = u_n$, $u_{n+1} = u_1$ で近似すると, $\mathrm{rank}A = n-1$ となり, A は $\beta = 0$ の場合を除いて非対称な $n \times n$ 行列である. さらに, $\boldsymbol{e} := (1, 1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}$ とおくと, $R(A)^{\perp} = \ker A = \langle \boldsymbol{e} \rangle$ が成り立つ. また, $M(A)$ は半負定値であり, $\mathrm{rank}\, M(A) = \mathrm{rank}A = n - 1$ である.

よって, 定理3.10より, この周期境界条件の場合に生じる連立一次方程式に GCR(k) 法を適用した場合, 任意の初期解に対して破綻せず, 残差の $R(A)$ 成分は 0 に収束する. さらに, $\boldsymbol{f} \in R(A) = (\ker A)^{\perp} \iff \boldsymbol{f} \perp \ker A = \langle \boldsymbol{e} \rangle \iff (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{e}) = 0$ より, $(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{e}) = 0$ であれば $\boldsymbol{f} \in R(A)$ である. この場合, 定理3.11より, 近似解は最小二乗解:
$Q_1{A_{11}}^{-1}Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{f} + Q_2Q_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$ に収束する. その上, $\boldsymbol{x}_0 \in R(A)$ ならば, $\boldsymbol{x}_i$ はノルム最小の最小二乗解 (擬逆解)$Q_1A_{11}^{-1}Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{f}$ に収束する.

Neumann 境界条件の場合は, 境界条件を $-u_1 + u_2 = 0$, $u_{n-1} - u_n = 0$ で近似すると, 離散化で得られる連立一次方程式 $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$ において, A は $\beta = 0$ の場合を除いて非対称な $n \times n$ 行列である. また, $\mathrm{rank}A = n - 1$ となり, $\ker A = \langle \boldsymbol{e} \rangle$ である.

一方, $\boldsymbol{y} = \left(1, \frac{1}{\alpha_-}, \frac{\alpha_+}{\alpha_-^2}, \cdots, \frac{\alpha_+^{n-3}}{\alpha_-^{n-2}}, \frac{\alpha_+^{n-2}}{\alpha_-^{n-2}}\right)^{\mathrm{T}}$ とおくと, $R(A)^{\perp} = \langle \boldsymbol{y} \rangle$ である.

従って, $b = 0$ でない限り $R(A)^{\perp} \neq \langle \boldsymbol{e} \rangle = \ker A$, つまり $R(A)^{\perp} \neq \ker A$ となる. しかしながら, $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$ が成り立つ.

ここで, $(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{y}) = 0$ を充たすようにすれば, $\boldsymbol{f} \in R(A)$ となる.

しかし, GCR(k) 法が任意の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して破綻せずに残差の $R(A)$ 成分が 0 に収束するための必要十分条件 (定理3.18の条件 (2) である $M(A_{11})$ の定値性) を一般の場合に判定するのは簡単ではない.

ただし, 例えば, $n = 3$ の場合は $M(A_{11})$ は負定値であることが示せる. 従って, $\boldsymbol{b} \in R(A)(\boldsymbol{b} = \mathbf{0})$ であれば, $n = 3$ の場合は GCR(k) 法は任意の初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して破綻せずに収束する.

謝辞 本研究は文部科学省 科学研究費補助金の助成を受けている.

参考文献

[1] 阿部邦美, 緒方秀教, 杉原正顯, 張 紹良, 三井斌友, 特異な係数行列をもつ連立一次方程式に対する CR 法の収束性, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 9, No. 1 (1999), pp. 1–13.

[2] Eisenstat, S.C., Elman, H.C. and Schultz, M.H., Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 20, No. 2 (1983), pp. 345–357.

[3] 森正武, 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算, 岩波書店, 東京, 1994.

[4] Saad, Y. and Schultz, M.H., GMRES, A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, No. 3 (1986), pp. 856–869.

[5] Sleijpen, G.L.G. and H.A. van der Vorst, A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems, SIAM J. Matrix Anal. Appl., Vol. 17, No. 2, (1996), pp. 401–425.

[6] Strouboulis, T., Babuška, I. and Copps, K., The design and analysis of the generalized finite element method, *Computer Methods in Appl. Mech. and Eng.*, Vol. 181, Issue (1–3) (2000), pp. 43–69.