Conjugate Gradient Method

梅谷　信行

平成 22 年 7 月 22 日

目 次

1　目次

2　概要

CG 法 (Conjugate Gradient Methods, 共役勾配法) は M.R.Hestenes と E.Stiefel によって 1952 年に提案された方法である [1]

CG 法は正定値対称行列に対して使われる連立一次方程式を反復法で解くための手法である。

2.0.1　行列の正値対称性

ベクトル u, v の内積を (u, v) のように書く。

実行列 $\mathbf{A}$ が正定値対称とは、

$$(\mathbf{Au}, \mathbf{u}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbf{R}^n \quad (\ equality\ holds\ only\ if\ \ \mathbf{u} = 0 \quad) \tag{1}$$

ということであり、$\mathbf{A}$ が対称であるということは、

$$(\mathbf{Aa}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{Ab}) \quad \forall \mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbf{R}^n \tag{2}$$

が成り立つということである。

3　ＣＧ法の基本原理

今、次のような線形同次方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を解くとする。

CG 法は k 回目の反復において、次のようにこの方程式の解 $\mathbf{x}$ や誤差 $\mathbf{e}$ を用いて定義される誤差の $\mathbf{A}$ ノルム

$$\|\mathbf{e}\|_A^2 = (\mathbf{e}, \mathbf{Ae}) = \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}\|_A^2 = (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}, \mathbf{A}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x})) \geq 0 \quad (equality\ holds\ only\ if\ \ \mathbf{x}_k = \mathbf{x}) \tag{3}$$

を最小化するような近似解 $\mathbf{x}_k$ を部分空間 $\mathcal{K}_k + \mathbf{x}_0$ の中から見つける方法である。但し、$\mathcal{K}_k$ はクリロフ部分空間 (Krylov Subspace)$\mathcal{K}_k = span\{\mathbf{r}_0, \mathbf{Ar}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \cdots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}_0\}$ である。

つまり CG 法は次のような連立一次方程式の近似解 $\mathbf{x}_k$ を探すための方法である。

$$find \quad \mathbf{x}_k \in \mathbf{x}_0 + \mathcal{K}_k \quad that \quad minimize\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_A \tag{4}$$

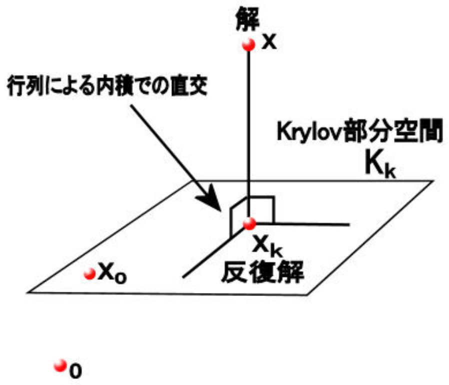

図 1: (ユークリッド空間で表した) C G法の反復解の様子

このように部分空間$\mathcal{K}_k + \mathbf{x}_0$の中で$\mathbf{x}$との$\mathbf{A}$ノルムで表される距離が極値をとるとき、明らかに次のような直交性の関係が成り立つ。

$$(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}, \mathbf{w})_{\mathbf{A}} = 0 \qquad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{K}_k \tag{5}$$

但し、行列によって定義される内積$(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{\mathbf{A}} = (\mathbf{A}\mathbf{a}, \mathbf{b})$とした。これを用いるとCG法は次のように表すことができる。

$$find \quad \mathbf{x}_k \in \mathbf{x}_0 + \mathcal{K}_k \qquad so \quad that \qquad \mathbf{x}_k - \mathbf{x} \quad \perp_{\mathbf{A}} \quad \mathcal{K}_k \tag{6}$$

但し$\perp_{\mathbf{A}}$とは次の関係を表している。

$$\mathbf{a} \quad \perp_{\mathbf{A}} \quad \mathbf{b} \Leftrightarrow (\mathbf{a}, \mathbf{b})_{\mathbf{A}} = 0 \Leftrightarrow (\mathbf{A}\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{A}\mathbf{a} \perp \mathbf{b} \tag{7}$$

つまりCG法は解$\mathbf{x}$を部分空間$\mathcal{K}_k + \mathbf{x}_0$に行列により定義される内積において正射影する方法であるともいえる。クリロフ部分空間$\mathcal{K}_k$は有限次元部分空間であるから、完備な線形空間である。よってLax-Milgramの定理より、このような射影は常に存在する。

また、k回反復時における残差$\mathbf{r}_k$は$\mathbf{r}_k = \mathbf{A}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x})$であるから、CG法は次のように解を探すともいえる。

$$find \quad \mathbf{x}_k \in \mathbf{x}_0 + \mathcal{K}_k \qquad so \quad that \qquad \mathbf{r}_k \quad \perp \quad \mathcal{K}_k \tag{8}$$

これは残差$\mathbf{r}_k$が部分空間$\mathcal{K}_k$に直交するように、$\mathcal{K}_k + \mathbf{x}_0$の中から解を探すということを意味している。

CG 法はクリロフ部分空間の正規直交基底を作る方法である、Lanczos 法と深い関係にある。

4　基本的な手続き

4.1　解の増分

k 回目の反復解 $\mathbf{x}_k$ から $k+1$ 回目の反復解 $\mathbf{x}_{k+1}$ への解の増分を係数 α_k とベクトル $\mathbf{p}_k$ を用いて次のように書くとする。

$$\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k = \alpha_k \mathbf{p}_k \tag{9}$$

$\mathbf{p}$ は解の増分の方向を決めることから探索方向ベクトルと呼ぶ。

$k+2$ 回目の反復解 $\mathbf{x}_{k+2}$ への解の更新ベクトル $\mathbf{p}_{k+1}$ は次のように解 $\mathbf{x}_{k+1}$ の残差 $\mathbf{r}_{k+1}$、係数 β_k、１つ前の解の更新ベクトル $\mathbf{p}_k$ を用いて次のように決定する

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \tag{10}$$

係数 β、α をどのように決定するのかを以下で説明する。

4.2　係数 β の決定

前の議論から CG 法では厳密解 $\mathbf{x}$ と反復解 $\mathbf{x}_{k+1}$ の差がクリロフ部分空間 $\mathcal{K}_{k+1}$ に $\mathbf{A}$ ノルムにおいて直交していた。つまり、

$$\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x} \quad \perp_{\mathbf{A}} \quad \mathcal{K}_{k+1} \tag{11}$$

よって厳密解との差 $\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}$ がクリロフ部分空間 $\mathcal{K}_{k+1}$ と $\mathbf{A}$ ノルムにおいて直交する空間の中にあるのだから、この $\mathcal{K}_{k+1}$ に $\mathbf{A}$ ノルムで直交する空間の中から次の反復解 $\mathbf{x}_{k+2}$ への解の更新ベクトル $\mathbf{p}_{k+1}$ を決めたほうが $\mathbf{x}_{k+2}$ が厳密解に近くなるはずである。

後に示すように $\mathbf{p}_{k+1}$ の１つ前の探索方向ベクトル $\mathbf{p}_k$ は直交させようとする部分空間 $\mathcal{K}_{k+1}$ に入っている。つまり、

$$\mathbf{p}_k \in \mathcal{K}_{k+1} \tag{12}$$

よって、探索方向ベクトル $\mathbf{p}_{k+1}$ が $\mathcal{K}_{k+1}$ に $\mathbf{A}$ ノルムで直交するためには最低 $\mathbf{p}_k$ に $\mathbf{A}$ ノルムで直交することが必要条件である。つまり、

$$(\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{p}_k)_{\mathbf{A}} = (\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = 0 \tag{13}$$

後に示すように、上のように選んだ探索方向は $\mathbf{p}_k$ だけでなく、$\mathcal{K}_{k+1}$ 空間に $\mathbf{A}$ ノルムで直交する。

上の残差と１つ前の探索方向ベクトルから探索方向ベクトルを定める式、

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \tag{14}$$

から、残差 $\mathbf{r}_{k+1}$ をクリロフ部分空間 $\mathcal{K}_{k+1}$ と $\mathbf{A}$ ノルムで直交する空間に射影することで新しい探索方向ベクトル $\mathbf{p}_{k+1}$ が得られることを意味している。

またこの式から、β を決定することができる。

この式と２つ探索方向が直交する式 $(\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = 0$ に代入すると、パラメータ β は次のようになる。

$$\beta = -\frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)} \tag{15}$$

さらに、後に示す残差の直交性の関係式 $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = 0 \quad (\quad i \neq j \quad)$ を用いると、

$$(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = \left(\mathbf{r}_{k+1}, -\frac{1}{\alpha_k}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k)\right) = -\frac{1}{\alpha_k}(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1}) \tag{16}$$

$$(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = (\mathbf{r}_k + \beta_{k-1}\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = (\mathbf{r}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = \left(\mathbf{r}_k, -\frac{1}{\alpha_k}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k)\right) = \frac{1}{\alpha_k}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) \tag{17}$$

これにより、さらに係数 β_k は次の様に表すことができる。

$$\beta_k = -\frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)} = -\frac{-\frac{1}{\alpha_k}(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{\frac{1}{\alpha_k}(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)} = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)} \tag{18}$$

4.3 係数 α の決定

係数 α は次のステップでのポテンシャル ϕ_{k+1} を最小化するように決められる。次のステップにおけるポテンシャル ϕ_{k+1} は

$$\phi_{k+1} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{x}_{k+1}) - (\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{f}) \tag{19}$$

$$= \frac{1}{2}((\mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{p}_k), \mathbf{A}(\mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{p}_k)) - ((\mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{p}_k), \mathbf{f}) \tag{20}$$

$$= \left\{\frac{1}{2}(\mathbf{x}_k, \mathbf{A}\mathbf{x}_k) - (\mathbf{x}_k, \mathbf{f})\right\} + \alpha\left\{\frac{1}{2}(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{x}_k) + \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) - (\mathbf{p}_k, \mathbf{f})\right\} \tag{21}$$

$$+\alpha^2\left\{\frac{1}{2}(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)\right\} \tag{22}$$

$$= \phi_k + \alpha\left(\mathbf{p}_k, \frac{\mathbf{A}+\mathbf{A}^T}{2}\mathbf{x}_k - \mathbf{f}\right) + \alpha^2\left\{\frac{1}{2}(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)\right\} \tag{23}$$

行列 $\mathbf{A}$ は対称であったので、$\frac{\mathbf{A}+\mathbf{A}^T}{2} = \mathbf{A}$ となる。よって

$$\phi_{k+1} = \phi_k + \alpha(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) + \alpha^2\left\{\frac{1}{2}(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)\right\} \tag{24}$$

ポテンシャル ϕ_{k+1} が最小値をとるとき, ポテンシャル ϕ_{k+1} は極値をとるので

$$\frac{\partial\phi_{k+1}}{\partial\alpha} = 0 \tag{25}$$

よってこれを計算すると

$$(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) = \alpha(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) \tag{26}$$

となるので係数 α は次のようになる。

$$\alpha = \frac{(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)} \tag{27}$$

さらに、後に示す残差の直交性の関係式 $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = 0 \quad (\quad i \neq j \quad)$ を用いると、

$$(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{r}_k - \beta_{k-1}\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) \tag{28}$$

これにより、さらに係数 α_k は次の様に表すことができる。

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)} = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)} \tag{29}$$

これらを用いると CG 法のアルゴリズムは次のようになる

4.4 アルゴリズム (CG 法)

1. *Compute* $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0, \mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$

2. *For* $k = 0, 1, \ldots, m$ *Do* :

   (a) $\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}$

   (b) $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$

   (c) $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}_k$

   (d) $\beta_k = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}$

   (e) $\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$

3. *End Do*

5 クリロフ部分空間と CG 法

CG 法はクリロフ部分空間法の一種である。クリロフ部分空間法とは、クリロフ部分空間の中でもっとも解に近い近似解を求める方法である。

以下では CG 法がクリロフ部分空間法であることを証明する ただし部分空間 $\bar{\mathcal{K}}_k, \tilde{\mathcal{K}}_k, \mathcal{K}_k$ については

$$\bar{\mathcal{K}}_k = span\{\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \cdots, \mathbf{p}_{k-1}\} \tag{30}$$

$$\tilde{\mathcal{K}}_k = span\{\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_{k-1}\} \tag{31}$$

$$\mathcal{K}_k = span\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \cdots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}_0\} \tag{32}$$

とする。

5.1 $\mathcal{K}_k = \tilde{\mathcal{K}}_k = \bar{\mathcal{K}}_k$ の証明

数学的帰納方を使って証明する

- **$k = 1$ のとき**
  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{p}_0$ より自明である。

- $k > 1$ **のとき**

  k において成立っていると仮定する。この場合、k+1 においても成立つかどうか調べる。

  $\mathbf{p}_k = \alpha(\mathbf{r}_k + \beta\mathbf{p}_{k-1})$, $\mathbf{p}_k \in \bar{\mathcal{K}}_{k+1}$, $\mathbf{r}_k \in \tilde{\mathcal{K}}_{k+1}$ である。

  また帰納法の仮定より $\mathbf{p}_{k-1} \in \bar{\mathcal{K}}_k = \tilde{\mathcal{K}}_k$ であるから $\bar{\mathcal{K}}_{k+1} = \tilde{\mathcal{K}}_{k+1}$ が成立つ。

  $\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_{k-1} + \alpha\mathbf{A}\mathbf{p}_{k-1}$, $\mathbf{r}_k \in \tilde{\mathcal{K}}_{k+1}$ である。帰納法の仮定より、$\mathbf{r}_{k-1} \in \tilde{\mathcal{K}}_k = \mathcal{K}_k$, $\mathbf{p}_{k-1} \in \mathcal{K}_k$, $\mathbf{A}\mathbf{p}_{k-1} \in \mathcal{K}k + 1$ であるから $\tilde{\mathcal{K}}_{k+1} = \mathcal{K}_{k+1}$ が成立つ

  以上より $\bar{\mathcal{K}}_{k+1} = \tilde{\mathcal{K}}_{k+1} = \mathcal{K}_{k+1}$ がいえる。

  k において命題が成立っていると仮定した場合は k+1 についても成立つことがわかる.

以上から数学的帰納法により命題は証明された.
ところで k 回目の反復時における解 $\mathbf{x}_k$ とすると、

$$\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_0 = \sum_{i=0}^{k-1} \Delta\mathbf{x}_i = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i \mathbf{p}_i \tag{33}$$

であるから

$$\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_0 \in \mathcal{K}_{k+1} = span\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \cdots, \mathbf{A}^k\mathbf{r}_0\} \tag{34}$$

であることがわかる。よって CG 法はクリロフ部分空間の中で解を探索するクリロフ部分空間法であるということがわかる。以下では残差 r が直交するという条件から CG 法が必ず n 解の反復で収束するということを示す。

5.2 $(\mathbf{r}_j, \mathbf{p}_i) = 0 \quad and \quad (\mathbf{A}\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_i) = 0 \quad (\quad for \quad 0 \le i < j \le n \quad)$ の証明

数学的帰納法を使って証明する

- $k = 1$ のとき

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_0) = (\mathbf{r}_0 - \alpha\mathbf{A}\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_0) = (\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0) - \frac{(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)}{(\mathbf{p}_0, \mathbf{A}\mathbf{p}_0)}(\mathbf{A}\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_0) = 0 \tag{35}$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{A}\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_0) &= (\mathbf{A}(\mathbf{r}_1 - \beta\mathbf{p}_0), \mathbf{p}_0) = (\mathbf{A}\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_0) - \frac{(\mathbf{r}_1, \mathbf{A}\mathbf{p}_0)}{(\mathbf{p}_0, \mathbf{A}\mathbf{p}_0)}(\mathbf{A}\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_0) \qquad (36)\\ &= (\mathbf{r}_1, \mathbf{A}^T\mathbf{p}_0) - (\mathbf{r}_1, \mathbf{A}\mathbf{p}_0) = 0 \qquad (37)\end{aligned}$$

ここで $\mathbf{A}$ が対称であるという条件 $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$ を用いた

- $k > 1$ のとき
  $0 \leq i < j \leq k$ について成立つと仮定する、ここで $0 \leq i < j \leq k+1$ についても成立つかどうか調べるためには $j = k+1$ において成立つかどうかを調べればよい。この場合 $i = k$ と $i \leq k$ の２つの場合に分けて考えると

  – $i = k$ のとき

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{p}_i) &= (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{p}_k) = (\mathbf{r}_k - \alpha \mathbf{A}\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k) && (38)\\
&= (\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k) - \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}(\mathbf{A}\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k) = 0 && (39)\\
(\mathbf{A}\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{p}_i) &= (\mathbf{A}\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{p}_k) = (\mathbf{A}(\mathbf{r}_{k+1} - \beta \mathbf{p}_k), \mathbf{p}_k) && (40)\\
&= (\mathbf{A}\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{p}_k) - \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}(\mathbf{A}\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k) && (41)\\
&= (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}^T\mathbf{p}_k) - (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = 0 && (42)
\end{aligned}
$$

  – $i < k$ のとき

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{p}_i) &= (\mathbf{r}_k - \alpha \mathbf{A}\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_i) && (43)\\
&= (\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_i) - \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}(\mathbf{A}\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_i) = 0 && (44)\\
(\mathbf{A}\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{p}_i) &= (\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_i) = (\mathbf{r}_{k+1} - \beta \mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_i) && (45)\\
&= (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{A}\mathbf{p}_i) - \beta(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_i) && (46)\\
&= \frac{1}{\alpha}(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}) - \beta(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_i) && (47)\\
&= \frac{1}{\alpha}(\mathbf{r}_{k+1}, (\mathbf{p}_i + \beta \mathbf{p}_{i-1}) - (\mathbf{p}_{i+1} + \beta \mathbf{p}_i)) - \beta(\mathbf{p}_k, \mathbf{A}\mathbf{p}_i) = 0 && (48)
\end{aligned}
$$

- よって $j = k+1$ のときでも成立つことから $0 \leq i < j \leq k+1$ についても成立つことがわかる

以上から数学帰納法を用いれば命題は証明される

5.3 $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = 0 \quad (\quad for \quad 0 \leq i < j \leq n \quad)$ の証明

数学的帰納法で証明する

- $k = 1$ のとき

$$(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = (\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_1) = 0 \tag{49}$$

- $k > 1$ のとき
  $0 \leq i < j \leq k$ について成立つと仮定する、ここで $0 \leq i < j \leq k+1$ についても成立つかどうか調べるためには $j = k+1$ において成立つかどうかを調べればよい。

$$\begin{aligned}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{k+1}) &= (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k - \alpha \mathbf{A}\mathbf{p}_k) = (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) - \alpha(\mathbf{A}\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_i) && (50)\\ &= (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) - \alpha(\mathbf{A}\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_i + \beta \mathbf{p}_{i-1}) = 0 && (51)\end{aligned}$$

  よって $j = k+1$ のときでも成立つことから $0 \leq i < j \leq k+1$ についても成立つことがわかる

以上から数学帰納法を用いれば命題は証明される

ここで残差ベクトルの列 $\mathbf{r}_i$ は互いに直交する線形独立なベクトルであることがわかった。線形独立なベクトルの数の最大値はベクトルの次元数 n であるので、残差ベクトルの列の数はベクトルの次元数 n より大きくならないことがわかる。このことから、理論上では

CG 法は必ずベクトルの次元数 n 回以下の反復数で収束する

ということがいえる。但し、これはあくまでこれは理論上の話で CG 法は丸め誤差の影響を強くうけるので、計算機上では CG 法は n 回の反復で完全に収束することはない。チェビシェフ不等式を用いると，さらに正確な収束条件を求めることができる.

6　複素数行列における CG 法

係数が複素数の場合は係数行列 A は対称行列ではなく、エルミート行列 (Hermetian Matrix) でなくてはならない。つまり

$$A^* = A \tag{52}$$

この場合にかぎり、内積 (p, Ap) は実数となる。また、固有値も全て実数となる。

係数行列がエルミート行列でなく、対称行列である場合は COCG 法 (Conjugate Orhogonal Conjugate Gradient Method) などを使って解くことができる。

またそうでない場合はCGNR法 (Conjugate Non-Linear Method)、などを用いて解く。

7　参考にしたもの

[1],[2],[3],[4]

参考文献

[1] Hestenes, M. and Stiefel, E.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J*, pp. 49–409.

[2] Wikipedia, : Conjugate gradient method, `http://en.wikipedia.org/wiki/Conjugate_gradient_method`.

[3] 土屋卓也：最急降下法と共役傾斜法について，`http://daisy.math.sci.ehime-u.ac.jp/users/tsuchiya/math/linear/variational/index.html`.

[4] Shewchuk, J.: An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain, `http://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf`.