

ICCG法と残差多項式

筑波大学電子・情報工学系 森 正武 (Masatake Mori)

1. CG法の残差多項式

CG法(共役傾斜法)の理論は従来幾何学的な側面から展開されてきたものが多い。それに対して, CG法の残差多項式を使う, いわば解析的な側面からの議論は比較的少ない。ここでは, CG法とICCG法に対応する残差多項式のグラフをいくつか具体的に示し, 収束状況その他について, これらのグラフからわかることを報告する。CG法の残差多項式については, 参考文献[1], [2]に詳しい。

対称正定値行列を係数にもつ連立1次方程式

$$Ax = b$$

の解をCG法で求める標準的な手順は次のように書くことができる。

$x_0 \dots$ initial guess

$$r_0 = b - Ax_0 \quad : R_0(\lambda) = 1$$

$$p_0 = r_0 \quad : P_0(\lambda) = 1$$

$k = 0, 1, 2, \dots$

$$\left[\begin{array}{l} \alpha_k = \frac{(r_k, r_k)}{(p_k, Ap_k)} \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\ r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \quad : R_{k+1}(\lambda) = R_k(\lambda) - \alpha_k \lambda P_k(\lambda) \quad (1) \\ \text{if } \|r_{k+1}\| \leq \varepsilon \|b\| \text{ then end} \\ \beta_k = \frac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_k, r_k)} \\ p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k \quad : P_{k+1}(\lambda) = R_{k+1}(\lambda) + \beta_k P_k(\lambda) \quad (2) \end{array} \right.$$

このとき, 右側の欄に示した λ の多項式

$$R_0(\lambda), R_1(\lambda), R_2(\lambda), \dots$$

を, CG法の残差多項式という. 容易に確かめられるように, 残差多項式 $R_k(\lambda)$ と残差との間には次の関係が成立する.

$$r_k = R_k(A) r_0$$

2. 残差多項式から見たCG法の特性

行列 A の固有値と対応する固有ベクトルをそれぞれ λ_j, u_j と書く. すなわち,

$$A u_j = \lambda_j u_j$$

とする. このとき, 初期残差を $\{u_j\}$ で展開して

$$r_0 = \sum_{j=1}^n c_j u_j \quad (3)$$

のように書くと, 第 k ステップにおける残差は

$$\begin{aligned} r_k &= R_k(A) r_0 \\ &= \sum_{j=1}^n c_j R_k(\lambda_j) u_j \end{aligned}$$

と表される. したがって,

$$(r_k, r_k) = \sum_{j=1}^n c_j^2 \{R_k(\lambda_j)\}^2 \quad (4)$$

および

$$\begin{aligned} (r_k, r_m) &= \sum_{j=1}^n c_j^2 R_k(\lambda_j) R_m(\lambda_j) \\ &= 0, \quad k \neq m \end{aligned} \quad (5)$$

が成立する. 前者の関係 (4) は, 残差ノルム $\|r_k\|$ は

(a) $\lambda = \lambda_j$ における $R_k(\lambda)$ の値 $R_k(\lambda_j)$ および

(b) 初期残差の固有ベクトル展開における展開の係数 c_j

によって決まることを示している. 後者の関係 (5) は, $\{R_0(\lambda), R_1(\lambda), \dots, R_{n-1}(\lambda)\}$ が

離散点	λ_1	λ_2	$\dots$	λ_n
重み	c_1^2	c_2^2		c_n^2

に関する選点直交多項式系を成すことを示している。

さらに、(3)の展開係数の中に0のものがあれば、(4)よりそれに対応する固有値のところで $R_k(\lambda) = 0$ がみたされる必要はなく、その分だけ収束が速く達成される。

残差多項式は一般に

$$R_k(0) = 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

をみたすことはその生成過程から明らかである。また $\{R_k(\lambda)\}$ と $\{P_k(\lambda)\}$ を生成する式(1)、(2)から $P_k(\lambda)$ を消去すると、 $\{R_k(\lambda)\}$ に関する次の漸化式が導かれる。

$$\begin{aligned} R_0(\lambda) &= 1, \quad R_1(\lambda) = -\alpha_0 \lambda + 1 \\ R_k(\lambda) &= \left(-\alpha_{k-1} \lambda + 1 + \frac{\alpha_{k-1} \beta_{k-2}}{\alpha_{k-2}} \right) R_{k-1}(\lambda) \\ &\quad - \frac{\alpha_{k-1} \beta_{k-2}}{\alpha_{k-2}} R_{k-2}(\lambda) \quad (6) \\ k &= 2, 3, \dots \end{aligned}$$

選点直交多項式 $\{R_0(\lambda), R_1(\lambda), \dots, R_{n-1}(\lambda)\}$ を上の上の漸化式によって生成すると、その選点直交性から

$$R_n(\lambda_j) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

が成立する。これは

$$r_n = 0$$

すなわち、CG法が理論的にn回の反復で収束することを示している。

もしも、 λ_{n-1} と λ_n が縮退しているとする、(4)で $k = n-1$ とおくことにより

$$\begin{aligned} (r_{n-1}, r_{n-1}) &= \sum_{j=1}^{n-2} c_j^2 \{R_{n-1}(\lambda_j)\}^2 \\ &\quad + (c_{n-1}^2 + c_n^2) \{R_{n-1}(\lambda_{n-1})\}^2 \end{aligned}$$

が成り立ち、 $R_{n-1}(\lambda)$ が生成された段階で

$$R_{n-1}(\lambda_j) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n-1$$

となって

$$r_{n-1} = 0$$

が成立する。すなわち， $n-1$ 回目の反復で収束が達成されたことになる。つまり，固有値に縮退があれば，その分だけ収束は速くなる。

3. 残差多項式のグラフ

最初の例として，次の10元連立1次方程式をとり上げる。

$$A_1 x = b_1$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad b_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

この方程式に対して，初期ベクトル

$$x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$$

を選んだ場合の残差多項式のグラフを図1に示してある。中央の横軸にある短い縦線は，行列Aの固有値の位置を示す。

10元連立1次方程式なので，10回目の反復 ($k=10$) で $R_{10}(\lambda)$ の根がすべて固有値と一致しており，したがって(4)よりたしかに $r_{10}=0$ となることがわかる。しかし，そのときの残差多項式 $R_{10}(\lambda)$ の振幅はその前後の $k=9$ ， $k=11$ の場合に比較してひじょうに大きい。これは，Lagrange補間におけるいわゆるRungeの現象に近い現象と解釈される。

CG法の計算には必ず丸め誤差が伴うので，次元数を越えてさらに反復を続けることができる。実際に残差多項式に対しても反復を続けていくと，興味ある現象が観察される。それは，図1に見るように， $k=11$ および $k=12$ ですべての固有値が $R_{11}(\lambda)$ および $R_{12}(\lambda)$ の根になったままであり，しかも $R_{11}(\lambda)$ では最も右側の固有値が，そして $R_{12}(\lambda)$ では最も右側および右側から5番目の固有値が重根になっていることである。

この反復過程の各ステップにおける $\alpha_k (= \text{ALPHA}(k))$ ， $\beta_k (= \text{beta}(k))$ などを表1に示してある。res($k+1$)は，漸化式によって生成した r_{k+1} のノルムではなく，

第 $k+1$ ステップにおける実際の残差, すなわち $b - Ax_{k+1}$ のノルムである.

上に述べた重根が現れる現象をさらに確かめるために, 次の3元の連立1次方程式について同様のことを調べてみる.

$$A_2 x = b_2$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad b_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

初期ベクトルを

$$x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$$

のように選んだ場合の残差多項式のグラフが図2である. この図を見ると, 確かに $R_3(\lambda)$ の3根, すなわち3個の固有値はそれ以後の反復における $R_k(\lambda)$ の根であり続ける. ただし, $R_4(\lambda)$ ($k=4$) のように, 新たに固有値と異なる根も加わる場合も観察される. しかし, 反復回数が3 (=次元数) の倍数のときには必ず重根になっている. すなわち, 3個の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ はすべて, $R_3(\lambda)$ の単根, $R_6(\lambda)$ の2重根, $R_9(\lambda)$ の3重根, $R_{12}(\lambda)$ の4重根となっている. この理由は, 本節の最後に述べる.

この反復過程における各ステップでの α_k, β_k などの値を表2に示す.

第3の例として, 次の9元連立1次方程式を取り上げる.

$$A_3 x = b_3$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \quad b_3 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

この方程式に対して, 初期ベクトル

$$x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$$

を選んだ場合の残差多項式のグラフを図3に示す. いまの場合の行列 A の固有値と固有ベクトルを表3に示す. これからわかるように, この行列の固有値は中央が3重に, その両脇の二つが2重に縮退していることがわかる.

この反復過程における各ステップでの α_k, β_k などの値を表4に示す.

図3で注目されることは, この2重に縮退した固有値は残差多項式 $R_k(\lambda)$ の根

とならないことである。これは、初期残差ベクトルを固有ベクトルによって(3)のように展開したとき、この2重に縮退した固有値の展開係数が0であることに対応している。実際、初期残差ベクトル r_0 が、2重に縮退している固有値に対応するすべての固有ベクトルと直交することが容易に確かめられる。

そこで、初期ベクトル x_0 の成分をすべて0としないで、これらを適当な乱数で与えてその反復過程の様子を調べてみた。残差多項式のグラフを図4に示す。この場合には、相異なる固有値の個数と等しい $k=5$ 回の反復で、これら5個の固有値がすべて $R_5(\lambda)$ の根と一致している。

この反復過程における各ステップでの α_k , β_k などの値を表5に示す。

さて、(次元数 $\times m$) 回の反復で残差多項式のすべての根が m 重根になる理由は次のように考えられる。 n 次元連立1次方程式に対するCG法では、理論的には n 回の反復で残差が0になる。つまり、 $r_n=0$ が成立する。したがって、

$$\beta_{n-1} = \frac{(r_n, r_n)}{(r_{n-1}, r_{n-1})} = 0$$

となり、これから $p_n = r_n = 0$ が成り立つ。ところが、実際の計算では丸め誤差の影響で $r_n=0$ とはならない。しかし、 β_{n-1} はひじょうに小さな数になる。そのために、 $p_n \div r_n$ より

$$\begin{aligned} r_{n+1} &\div r_n - \alpha_n A r_n \\ &= (I - \alpha_n A) r_n, \end{aligned}$$

すなわち、

$$R_{n+1}(\lambda) \div (1 - \alpha_n \lambda) R_n(\lambda)$$

が成立する。この関係が成立すると、漸化式(6)より明らかなように、 $R_n(\lambda)$ は、近似的にはあるが、 $n+1$ 回目以後の反復において生成されるすべての残差多項式の共通の因数として保存されることになる。一方、CG法の原理によって、任意の初期値、たとえば $R_n(\lambda)$ から出発して n 回反復すると、新たに生成された n 次分の多項式の根は必ず行列 A の固有値に等しくなる。こうして、 $R_n(\lambda)$ を新たな初期値として $n+1$ 回以降反復を続けると、第2ラウンドの残差多項式

$$R_n(\lambda), R_{n+1}(\lambda), \dots, R_{2n-1}(\lambda), R_{2n}(\lambda)$$

が生成され、 $R_{2n}(\lambda)$ には、 n 回反復したことによって再び生じた $R_n(\lambda)$ の n 個の根と、共通因数として保存された n 個の根とが重なって、その n 個の根はすべ

て重根となる。同様にして、第3ラウンドの反復で生成される $R_{3n}(\lambda)$ の n 個の根はすべて3重根になる。

このように、 n 回以上反復を続けると $R_k(\lambda)$ には重根が現れるが、丸め誤差の影響で固有値 λ_j が $R_k(\lambda)$ ($k > n$) の根からわずかにずれることの影響は、重根の場合にはその多重度分のオーダーだけ飛躍的に小さくなる。つまり、CG法では n 回を越えて反復を行っても、丸め誤差の影響は改善の方向へ向くわけである。

4. ICCG法の残差多項式

第3の例 $A_3 x = b_3$ にICCG法を適用してみる。ここでは、行列 A_3 の非零成分のあったところだけについて不完全LU分解を行う前処理を採用する。 $A = A_3$ の不完全LU分解を

$$A \doteq L D L^T$$

と書くと、この場合のICCG法の手順は次のように書ける。

$$\begin{aligned} & x_0 \dots \text{initial guess} \\ & r_0 = b - A x_0 \quad : R_0(\lambda) = 1 \\ & p_0 = [L D L^T]^{-1} r_0 \quad : P_0(\lambda) = 1 \\ & k = 0, 1, 2, \dots \\ & \left[\begin{aligned} & \alpha_k = \frac{(r_k, [L D L^T]^{-1} r_k)}{(p_k, A p_k)} \\ & x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\ & r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \quad : R_{k+1}(\lambda) = R_k(\lambda) - \alpha_k \lambda P_k(\lambda) \\ & \text{if } \|r_{k+1}\| \leq \varepsilon \|b\| \text{ then end} \\ & \beta_k = \frac{(r_{k+1}, [L D L^T]^{-1} r_{k+1})}{(r_k, [L D L^T]^{-1} r_k)} \\ & p_{k+1} = [L D L^T]^{-1} r_{k+1} + \beta_k p_k : P_{k+1}(\lambda) = R_{k+1}(\lambda) + \beta_k P_k(\lambda) \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

このとき、 r_k および p_k は次のように書ける。

$$r_k = R_k(A [L D L^T]^{-1}) r_0$$

$$p_k = [L D L^T]^{-1} P_k(A [L D L^T]^{-1}) r_0$$

初期近似解を適当な乱数で定めた場合の、この反復過程における各ステップでの α_k , β_k などの値を表6に示す。また、上のICCG法で生成された残差多項式のグラフは図5のようになる。

この図からわかるように、良い前処理を行うと、ICCG法の残差多項式は反復が進むにつれて単に固有値を根とするようになるだけでなく、その値自体も急速に小さくなる。また、当然ながら、前処理を行った行列 $A(LDL^T)^{-1}$ の固有値は、0から離れた所に密集して分布している。グラフの形をより正確に見るために、同じ残差多項式を、縦軸のスケールを反復毎に $1/10$ にしながら表示したものを、図6に示す。

表6からもわかるように、前処理を行った場合には α_k に比較して β_k の値がかなり小さくなる。したがって、漸化式(6)より

$$R_k(\lambda) = (-\alpha_{k-1}\lambda + 1) R_{k-1}(\lambda)$$

が成り立ち、反復を1回進めるということは $(-\alpha_{k-1}\lambda + 1)$ を1回乗ずることとほぼ等しくなる。つまり、図7において、曲線 $R_{k-1}(\lambda)$ に $1/\alpha_{k-1}$ を通る直線 $-\alpha_{k-1}\lambda + 1$ を乗じたものが $R_k(\lambda)$ に近い形になる。ICCG法では前処理によって行列の固有値が0から離れたところに密集して分布するので、1回の反復に対応するこの操作によって残差多項式の値自体が著しく小さくなるのである。いいかえれば、ICCG法では行列の固有値の分布が $1/\alpha_{k-1}$ の近くに集中し、1回の反復の操作がその所を集中的に狙って残差を小さくしようとするわけである。

前節のものも含めて、上に述べた乱数を成分にもつ解の初期ベクトル x_0^T の第 k 成分 x_k は、すべて次の混合合同式法によって生成したものである。

$$i_0 = 1, i_{k+1} = 1229i_k + 351750 \pmod{1664501}$$

$$x_k = i_k \cdot 1664501$$

参考文献

- [1] E.L.Stiefel, Kernel polynomials in linear algebra and their numerical applications, in Further Contributions to the Solution of Simultaneous Linear Equations and the Determination of Eigenvalues, NBS Applied Math. Ser. 9, 1-22 (1958).
- [2] 戸川隼人, 共役勾配法, 教育出版, 42-53 (1977).

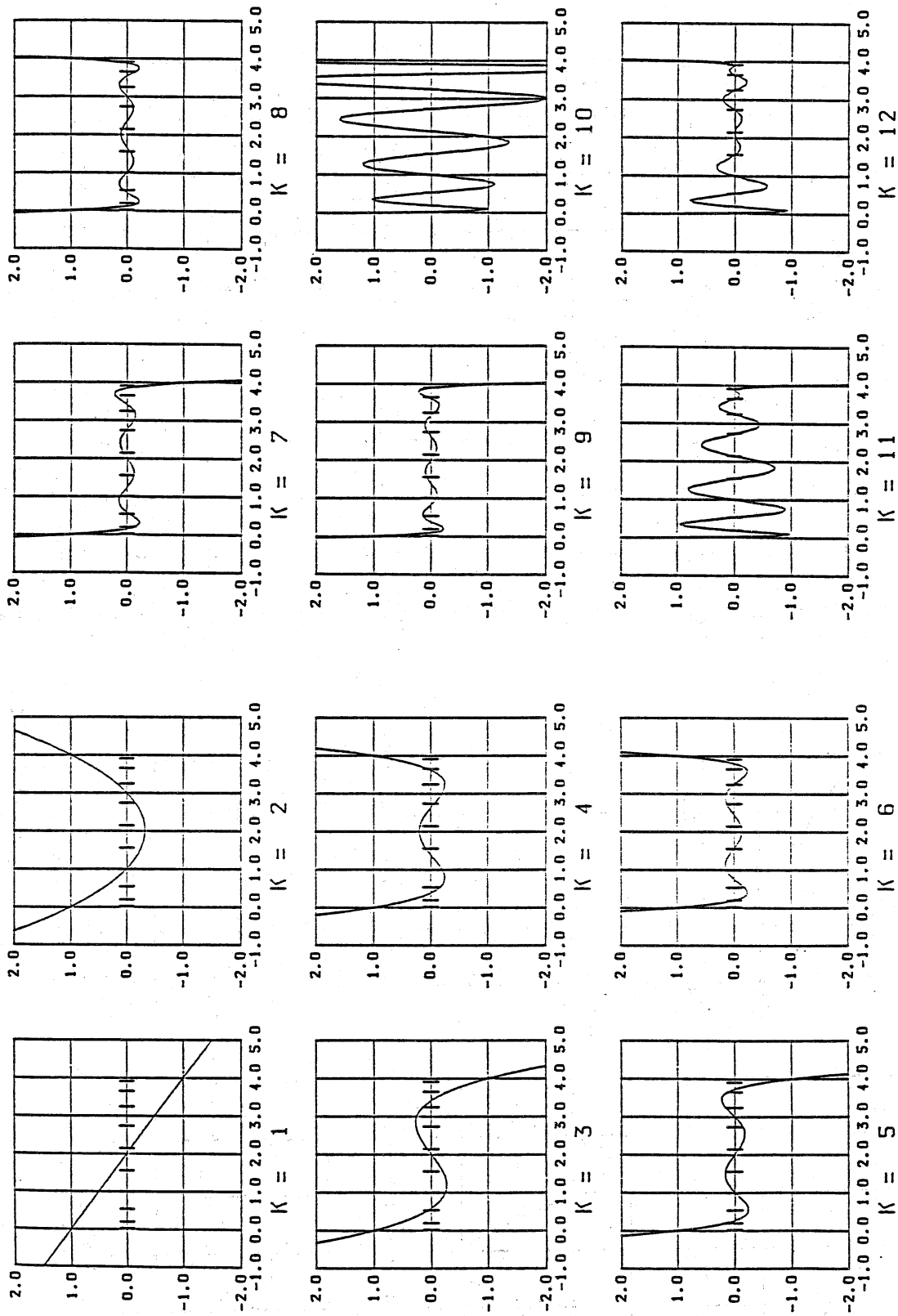


図1 $A_1 x = b_1$ に対するCG法の残差多項式 初期値 $x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$

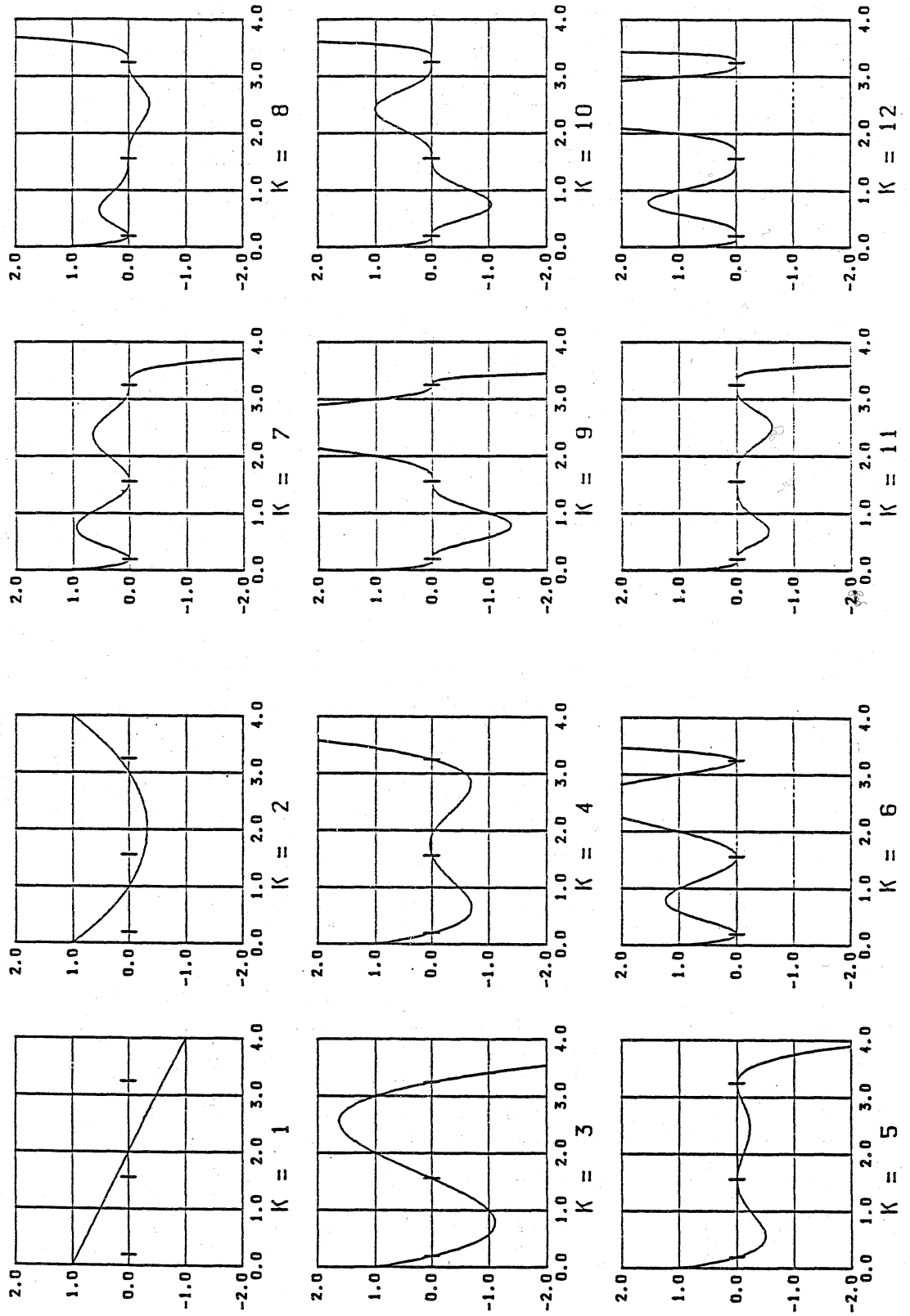


図2 $A_2 x = b_2$ に対するCG法の残差多項式 初期値 $x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$

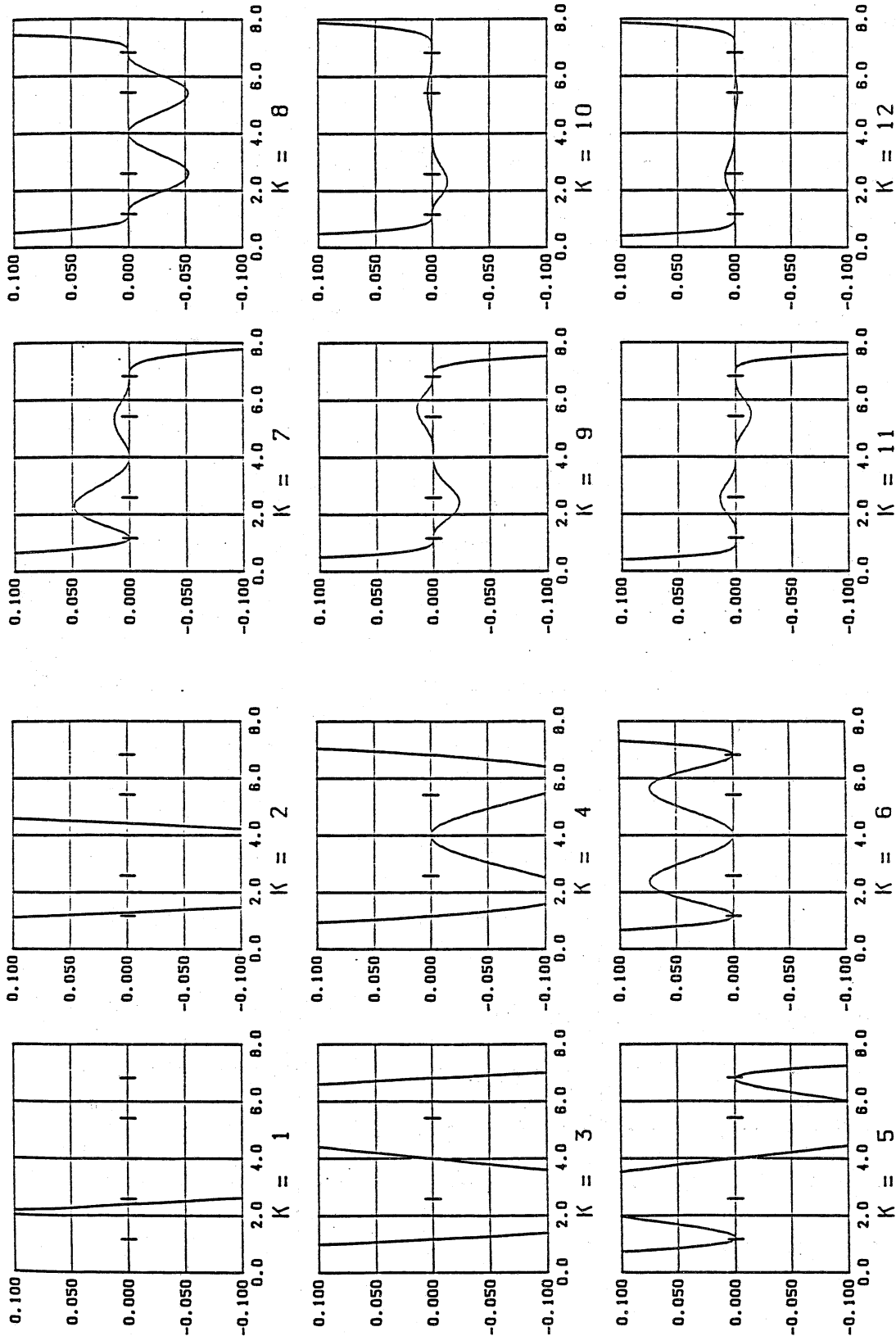


図3 $A_3 x = b_3$ に対するCG法の残差多項式 初期値 $x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$

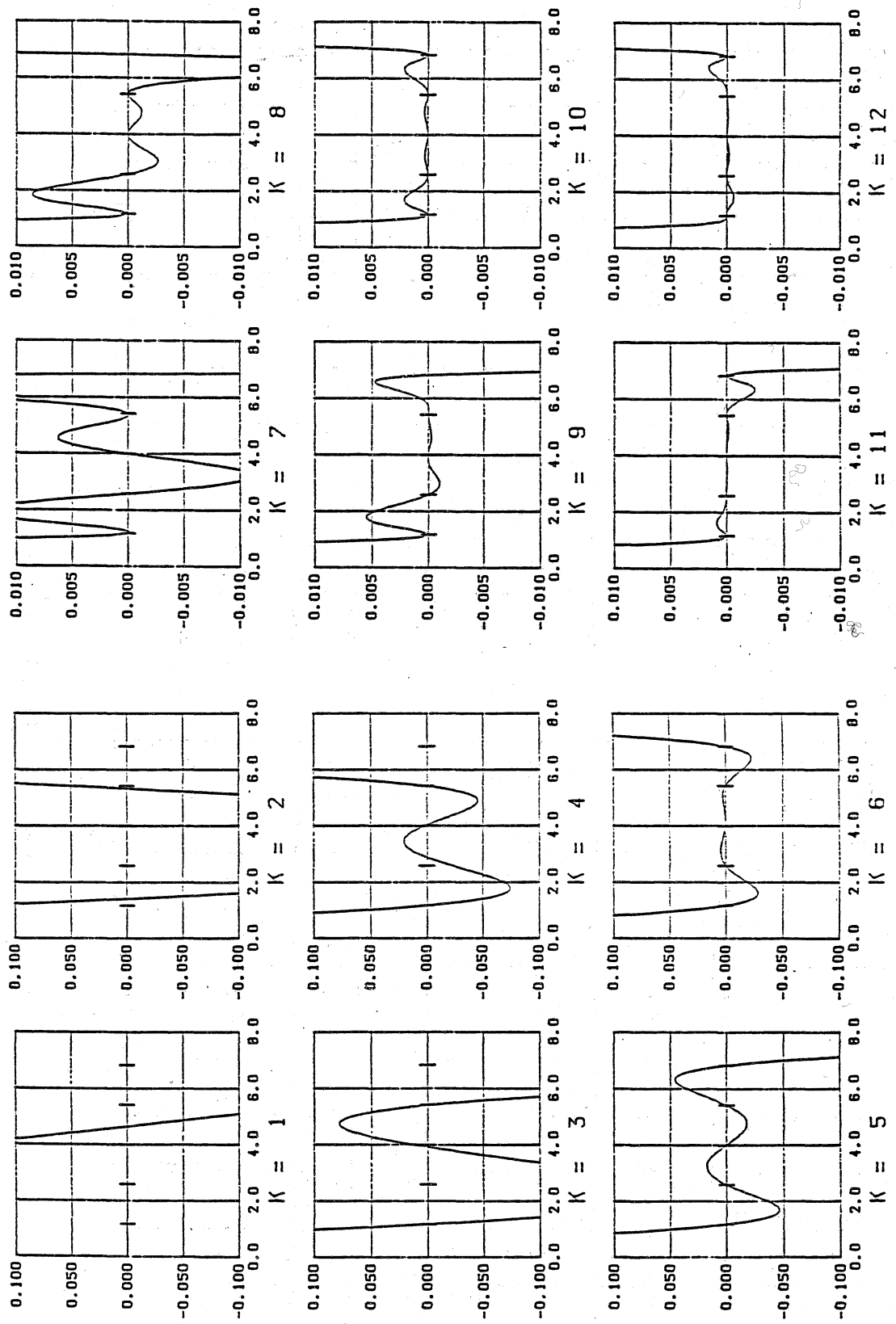


図4 $A_3x = b_3$ に対するCG法の残差多項式 初期値 $x_0^T = (\text{random})$

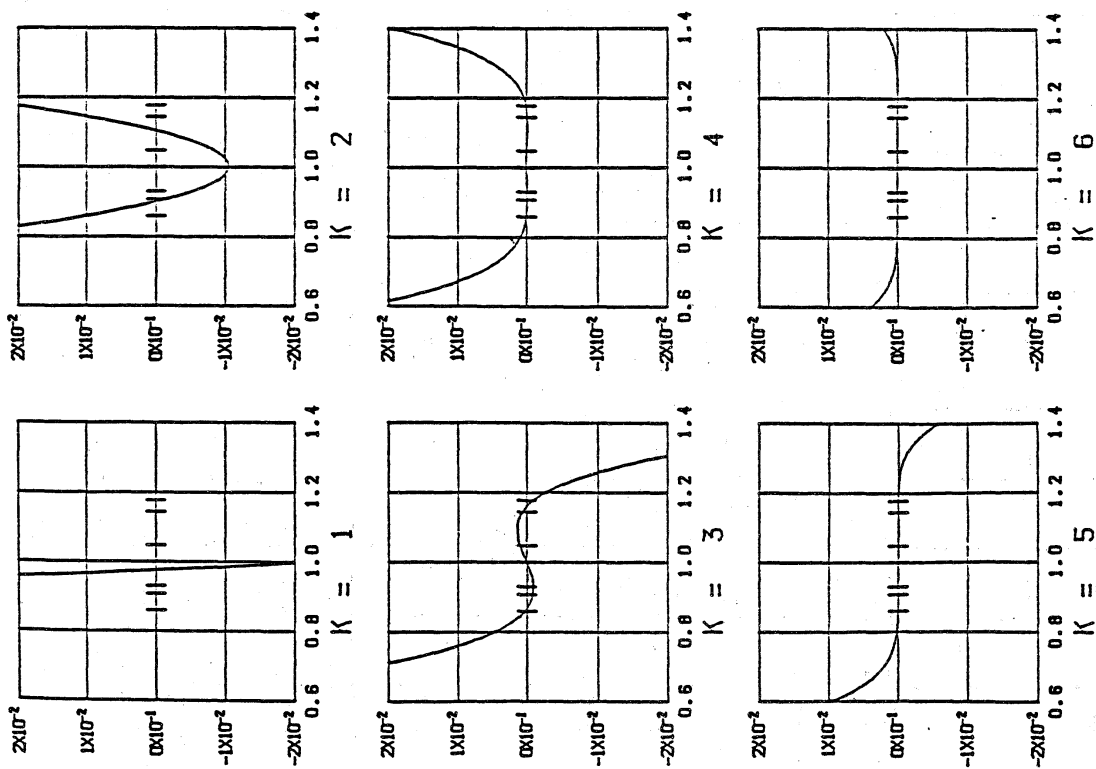


図5 $A_3x=b_3$ に対するICCG法の残差多項式 初期値 $x_0^I = (\text{random})$

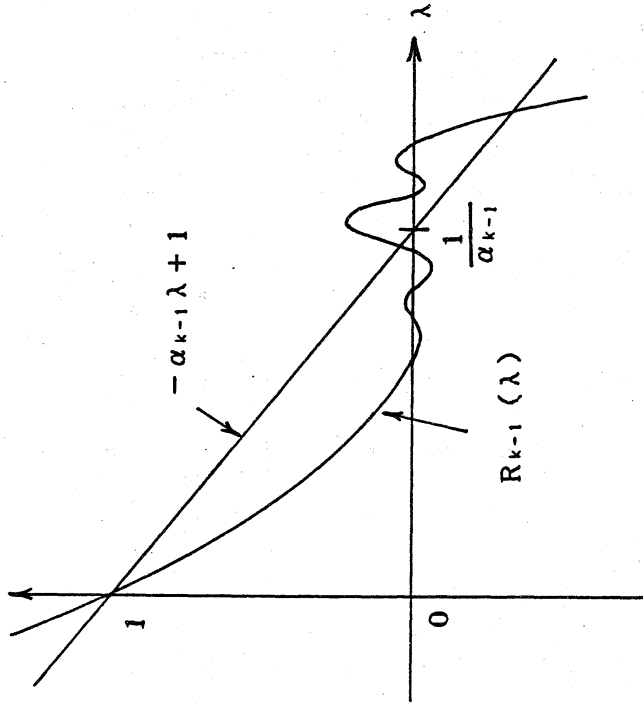


図7 ICCG法における1回の反復過程の幾何学的意味

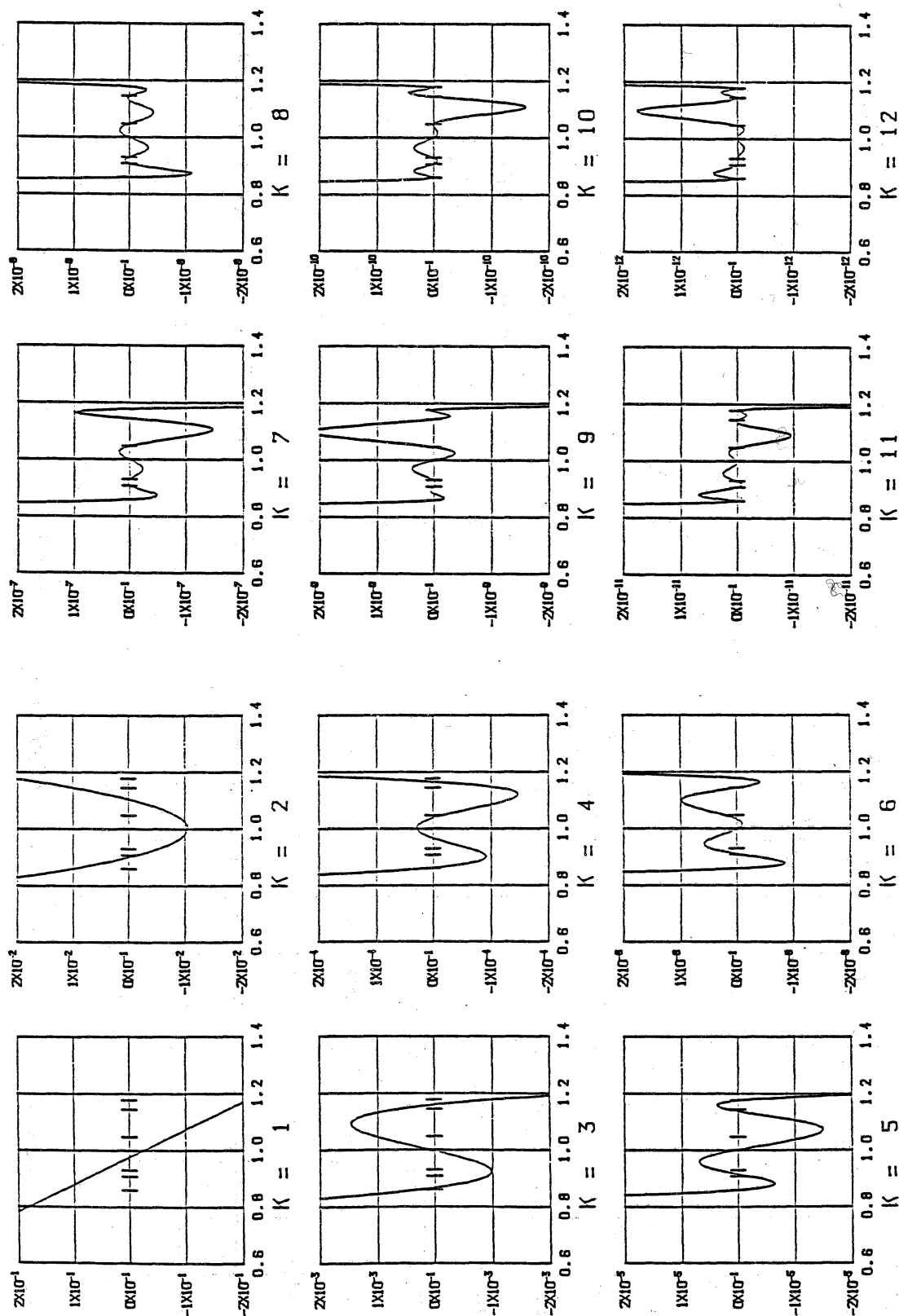


図6 $A_3 x = b_3$ に対するICCG法の残差多項式 初期値 $x_0^T = (\text{random})$

K	ALPHA(K)	DETA(K)	$\ r(k+1)\ /\ b\ $	$\ r(k)\ $	$\ res(k+1)\ $
0	5.000000 $\times 10^{-1}$	2.500000 $\times 10^{-1}$	5.00 $\times 10^{-1}$	1.00 $\times 10^0$	5.00 $\times 10^{-1}$
1	6.66667 $\times 10^{-1}$	4.44445 $\times 10^{-1}$	3.33 $\times 10^{-1}$	5.00 $\times 10^{-1}$	3.33 $\times 10^{-1}$
2	7.500000 $\times 10^{-1}$	5.62499 $\times 10^{-1}$	2.50 $\times 10^{-1}$	3.33 $\times 10^{-1}$	2.50 $\times 10^{-1}$
3	8.000000 $\times 10^{-1}$	6.399999 $\times 10^{-1}$	2.00 $\times 10^{-1}$	2.50 $\times 10^{-1}$	2.00 $\times 10^{-1}$
4	8.33333 $\times 10^{-1}$	6.94444 $\times 10^{-1}$	1.67 $\times 10^{-1}$	2.00 $\times 10^{-1}$	1.67 $\times 10^{-1}$
5	8.571429 $\times 10^{-1}$	7.34694 $\times 10^{-1}$	1.43 $\times 10^{-1}$	1.67 $\times 10^{-1}$	1.43 $\times 10^{-1}$
6	8.750000 $\times 10^{-1}$	7.65625 $\times 10^{-1}$	1.25 $\times 10^{-1}$	1.43 $\times 10^{-1}$	1.25 $\times 10^{-1}$
7	8.88889 $\times 10^{-1}$	7.90123 $\times 10^{-1}$	1.11 $\times 10^{-1}$	1.25 $\times 10^{-1}$	1.11 $\times 10^{-1}$
8	9.000000 $\times 10^{-1}$	8.099995 $\times 10^{-1}$	1.00 $\times 10^{-1}$	1.11 $\times 10^{-1}$	1.00 $\times 10^{-1}$
9	1.000000 $\times 10^1$	1.332399 $\times 10^{-8}$	1.15 $\times 10^{-5}$	1.00 $\times 10^{-1}$	1.12 $\times 10^{-5}$
10	2.592175 $\times 10^{-1}$	4.650783 $\times 10^{-3}$	7.07 $\times 10^{-7}$	1.15 $\times 10^{-5}$	1.26 $\times 10^{-6}$
11	4.811454 $\times 10^{-1}$	1.002815 $\times 10^{-1}$	3.42 $\times 10^{-7}$	7.07 $\times 10^{-7}$	1.22 $\times 10^{-6}$
12	6.670918 $\times 10^{-1}$	2.540395 $\times 10^{-1}$	1.72 $\times 10^{-7}$	3.42 $\times 10^{-7}$	1.34 $\times 10^{-6}$
13	6.514517 $\times 10^{-1}$	4.001140 $\times 10^{-1}$	1.09 $\times 10^{-7}$	1.72 $\times 10^{-7}$	1.23 $\times 10^{-6}$
14	6.535253 $\times 10^{-1}$	2.675710 $\times 10^{-1}$	5.63 $\times 10^{-8}$	1.09 $\times 10^{-7}$	1.30 $\times 10^{-6}$
15	7.459813 $\times 10^{-1}$	6.350984 $\times 10^{-1}$	4.49 $\times 10^{-8}$	5.63 $\times 10^{-8}$	1.30 $\times 10^{-6}$
16	7.832309 $\times 10^{-1}$	6.116022 $\times 10^{-1}$	3.51 $\times 10^{-8}$	4.49 $\times 10^{-8}$	1.30 $\times 10^{-6}$
17	1.797623 $\times 10^0$	1.058397 $\times 10^0$	4.79 $\times 10^{-8}$	3.51 $\times 10^{-8}$	1.20 $\times 10^{-6}$
18	1.567477 $\times 10^0$	2.351924 $\times 10^{-1}$	2.32 $\times 10^{-8}$	4.79 $\times 10^{-8}$	1.20 $\times 10^{-6}$
19	1.714720 $\times 10^1$	1.926482 $\times 10^{-3}$	1.02 $\times 10^{-9}$	2.32 $\times 10^{-8}$	1.21 $\times 10^{-6}$

表1 $A_1 x = b_1$ に対するCG法における α_k, β_k , 残差ノルム初期値 $x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$ 表2 $A_2 x = b_2$ に対するCG法における α_k, β_k , 残差ノルム初期値 $x_0^T = (0, 0, \dots, 0)$

K	ALPHA(K)	DETA(K)	$\ r(k+1)\ /\ b\ $	$\ r(k)\ $	$\ res(k+1)\ $
0	5.000000 $\times 10^{-1}$	2.500000 $\times 10^{-1}$	5.00 $\times 10^{-1}$	1.00 $\times 10^0$	5.00 $\times 10^{-1}$
1	6.66667 $\times 10^{-1}$	4.44445 $\times 10^{-1}$	3.33 $\times 10^{-1}$	5.00 $\times 10^{-1}$	3.33 $\times 10^{-1}$
2	3.000000 $\times 10^0$	3.197442 $\times 10^{-13}$	1.88 $\times 10^{-7}$	3.33 $\times 10^{-1}$	0.00 $\times 10^{-1}$
3	5.263159 $\times 10^{-1}$	1.357340 $\times 10^{-1}$	6.94 $\times 10^{-8}$	1.88 $\times 10^{-7}$	2.67 $\times 10^{-7}$
4	3.911764 $\times 10^{-1}$	3.122046 $\times 10^{-2}$	1.23 $\times 10^{-8}$	6.94 $\times 10^{-8}$	2.67 $\times 10^{-7}$
5	4.057142 $\times 10^0$	4.340975 $\times 10^{-11}$	8.09 $\times 10^{-14}$	1.23 $\times 10^{-8}$	1.88 $\times 10^{-7}$
6	3.096303 $\times 10^{-1}$	2.001305 $\times 10^{-3}$	4.28 $\times 10^{-15}$	8.09 $\times 10^{-14}$	1.88 $\times 10^{-7}$
7	6.426702 $\times 10^{-1}$	4.097600 $\times 10^{-3}$	2.74 $\times 10^{-16}$	4.28 $\times 10^{-15}$	1.88 $\times 10^{-7}$
8	5.025241 $\times 10^0$	1.256987 $\times 10^{-9}$	9.72 $\times 10^{-21}$	2.74 $\times 10^{-16}$	1.88 $\times 10^{-7}$
9	3.006989 $\times 10^{-1}$	1.223461 $\times 10^{-3}$	3.40 $\times 10^{-22}$	9.72 $\times 10^{-21}$	1.88 $\times 10^{-7}$
10	6.490079 $\times 10^{-1}$	1.004216 $\times 10^{-2}$	3.41 $\times 10^{-23}$	3.40 $\times 10^{-22}$	1.88 $\times 10^{-7}$
11	4.991315 $\times 10^0$	3.390554 $\times 10^{-7}$	1.98 $\times 10^{-26}$	3.41 $\times 10^{-23}$	1.88 $\times 10^{-7}$
12	3.000390 $\times 10^{-1}$	1.030461 $\times 10^{-4}$	2.02 $\times 10^{-28}$	1.98 $\times 10^{-26}$	1.88 $\times 10^{-7}$

eigen values of matrix C

J eigenvalue

1 6.020402
2 5.414200
3 5.414200
4 3.999975
5 3.999975
6 3.999975
7 2.505772
8 2.505772
9 1.171547

eigen vectors

-2.500005 $\times 10^{-1}$ -2.730202 $\times 10^{-1}$ -4.100745 $\times 10^{-1}$ 1.635064 $\times 10^{-1}$ -5.306041 $\times 10^{-1}$ -2.583111 $\times 10^{-1}$
3.535539 $\times 10^{-1}$ 4.072474 $\times 10^{-1}$ 1.031209 $\times 10^{-1}$ -4.400005 $\times 10^{-2}$ -2.289031 $\times 10^{-1}$ 4.423448 $\times 10^{-1}$
-2.497972 $\times 10^{-1}$ -4.100741 $\times 10^{-1}$ 2.730240 $\times 10^{-1}$ -6.005683 $\times 10^{-1}$ 6.191901 $\times 10^{-2}$ -2.849009 $\times 10^{-2}$
3.535534 $\times 10^{-1}$ 4.072483 $\times 10^{-1}$ 1.031201 $\times 10^{-1}$ 4.399948 $\times 10^{-1}$ 2.209016 $\times 10^{-1}$ -4.423453 $\times 10^{-1}$
-5.000002 $\times 10^{-1}$ 5.364410 $\times 10^{-1}$ 1.220000 $\times 10^{-1}$ 4.450606 $\times 10^{-1}$ 4.686046 $\times 10^{-1}$ 2.868025 $\times 10^{-1}$
3.535532 $\times 10^{-1}$ 1.031302 $\times 10^{-1}$ -4.072492 $\times 10^{-1}$ 4.399966 $\times 10^{-2}$ 2.289011 $\times 10^{-1}$ -4.423423 $\times 10^{-1}$
-2.499999 $\times 10^{-1}$ 4.100750 $\times 10^{-1}$ -2.730281 $\times 10^{-1}$ -6.005562 $\times 10^{-1}$ 6.192001 $\times 10^{-2}$ -2.849187 $\times 10^{-2}$
3.535531 $\times 10^{-1}$ -4.072492 $\times 10^{-1}$ -1.031290 $\times 10^{-1}$ -4.399776 $\times 10^{-2}$ -2.289006 $\times 10^{-1}$ 4.423429 $\times 10^{-1}$
-2.499999 $\times 10^{-1}$ 2.730201 $\times 10^{-1}$ 4.100740 $\times 10^{-1}$ 1.635067 $\times 10^{-1}$ -5.306046 $\times 10^{-1}$ -2.583106 $\times 10^{-1}$
-2.910140 $\times 10^{-1}$ 4.060106 $\times 10^{-1}$ -2.497974 $\times 10^{-1}$
-4.934356 $\times 10^{-1}$ 0.075017 $\times 10^{-2}$ -3.535525 $\times 10^{-1}$
-4.060079 $\times 10^{-1}$ -2.910141 $\times 10^{-1}$ -2.500004 $\times 10^{-1}$
0.074704 $\times 10^{-2}$ 4.934351 $\times 10^{-1}$ -3.535529 $\times 10^{-1}$
-1.490116 $\times 10^{-1}$ 3.051753 $\times 10^{-7}$ -4.999999 $\times 10^{-1}$
-0.074975 $\times 10^{-2}$ -4.934366 $\times 10^{-1}$ -3.535537 $\times 10^{-1}$
4.060113 $\times 10^{-1}$ -2.910145 $\times 10^{-1}$ -2.500000 $\times 10^{-1}$
4.934372 $\times 10^{-1}$ -0.074020 $\times 10^{-2}$ -3.535537 $\times 10^{-1}$
2.910136 $\times 10^{-1}$ -4.060104 $\times 10^{-1}$ -2.500002 $\times 10^{-1}$

表3 行列A₃の固有値および固有ベクトル

K	ALPHA(K)	DETA(K)	#F(K+1)/#b#	#F(K) #	#res(K+1)#
0	4.16667 $\times 10^{-1}$	3.88890 $\times 10^{-1}$	6.24 $\times 10^{-1}$	4.47 $\times 10^0$	2.79 $\times 10^0$
1	4.199999 $\times 10^{-1}$	2.880000 $\times 10^{-1}$	3.35 $\times 10^{-1}$	2.79 $\times 10^0$	1.50 $\times 10^0$
2	1.785713 $\times 10^{-1}$	5.646276 $\times 10^{-13}$	2.51 $\times 10^{-7}$	1.50 $\times 10^0$	0.00 $\times 10^{-1}$
3	2.499996 $\times 10^{-1}$	4.747102 $\times 10^{-1}$	1.73 $\times 10^{-7}$	1.12 $\times 10^{-6}$	0.00 $\times 10^{-1}$
4	4.759358 $\times 10^{-1}$	9.162408 $\times 10^{-2}$	5.24 $\times 10^{-6}$	7.75 $\times 10^{-7}$	0.00 $\times 10^{-1}$
5	2.626404 $\times 10^{-1}$	1.724906 $\times 10^{-11}$	2.10 $\times 10^{-13}$	2.35 $\times 10^{-7}$	0.00 $\times 10^{-1}$
6	1.506812 $\times 10^{-1}$	2.381166 $\times 10^{-2}$	3.36 $\times 10^{-14}$	9.74 $\times 10^{-13}$	0.00 $\times 10^{-1}$
7	8.295640 $\times 10^{-1}$	1.252828 $\times 10^{-9}$	1.19 $\times 10^{-18}$	1.50 $\times 10^{-13}$	0.00 $\times 10^{-1}$
8	2.285613 $\times 10^{-1}$	4.817212 $\times 10^{-2}$	2.61 $\times 10^{-19}$	5.32 $\times 10^{-18}$	0.00 $\times 10^{-1}$
9	1.603435 $\times 10^{-1}$	7.525226 $\times 10^{-4}$	7.16 $\times 10^{-21}$	1.17 $\times 10^{-18}$	0.00 $\times 10^{-1}$
10	8.52677 $\times 10^{-1}$	7.222507 $\times 10^{-9}$	6.09 $\times 10^{-25}$	3.20 $\times 10^{-20}$	0.00 $\times 10^{-1}$
11	1.502911 $\times 10^{-1}$	1.047919 $\times 10^{-2}$	6.23 $\times 10^{-28}$	2.72 $\times 10^{-24}$	0.00 $\times 10^{-1}$
12	2.438748 $\times 10^{-1}$	7.783230 $\times 10^{-4}$	1.74 $\times 10^{-27}$	2.79 $\times 10^{-25}$	0.00 $\times 10^{-1}$
13	8.526070 $\times 10^{-1}$	2.283449 $\times 10^{-7}$	8.31 $\times 10^{-31}$	7.77 $\times 10^{-27}$	0.00 $\times 10^{-1}$
14	1.465567 $\times 10^{-1}$	3.116110 $\times 10^{-4}$	1.47 $\times 10^{-32}$	3.72 $\times 10^{-30}$	0.00 $\times 10^{-1}$
15	2.501304 $\times 10^{-1}$	9.008977 $\times 10^{-4}$	4.40 $\times 10^{-34}$	6.56 $\times 10^{-32}$	0.00 $\times 10^{-1}$
16	8.524643 $\times 10^{-1}$	8.604813 $\times 10^{-6}$	1.29 $\times 10^{-36}$	1.97 $\times 10^{-33}$	0.00 $\times 10^{-1}$
17	1.464488 $\times 10^{-1}$	5.768571 $\times 10^{-6}$	3.10 $\times 10^{-39}$	5.77 $\times 10^{-36}$	0.00 $\times 10^{-1}$
18	2.501237 $\times 10^{-1}$	0.000000 $\times 10^{-1}$	0.00 $\times 10^{-1}$	1.39 $\times 10^{-38}$	0.00 $\times 10^{-1}$

表4 A₃ x = b₃に対するCG法における α_k , β_k , 残差ノルム初期値 $x_0 = (0, 0, 0, \dots, 0)$

K	ALPHA(K)	BETA(K)	$\ r(K+1)\ /\ b\ $	$\ r(K)\ $	$\ res(K+1)\ $	K	ALPHA(K)	BETA(K)	$\ r(K+1)\ /\ b\ $	$\ r(K)\ $	$\ res(K+1)\ $
0	2.151971x10 ⁻¹	1.021210x10 ⁻¹	2.92x10 ⁻¹	4.09x10 ⁰	1.31x10 ⁰	0	1.024435x10 ⁰	1.022872x10 ⁻²	7.71x10 ⁻²	4.09x10 ⁰	3.45x10 ⁻¹
1	6.105343x10 ⁻¹	2.750398x10 ⁻¹	1.53x10 ⁻¹	1.31x10 ⁰	6.86x10 ⁻¹	1	9.809940x10 ⁻¹	1.068106x10 ⁻²	0.85x10 ⁻³	3.45x10 ⁻¹	3.96x10 ⁻²
2	3.001073x10 ⁻¹	1.199092x10 ⁻²	1.68x10 ⁻²	6.86x10 ⁻¹	7.51x10 ⁻²	2	9.923401x10 ⁻¹	2.683974x10 ⁻³	5.86x10 ⁻⁴	3.96x10 ⁻²	2.62x10 ⁻³
3	3.395231x10 ⁻¹	1.430333x10 ⁻¹	6.37x10 ⁻³	7.51x10 ⁻²	2.05x10 ⁻²	3	9.928803x10 ⁻¹	1.211435x10 ⁻²	6.08x10 ⁻⁵	2.62x10 ⁻³	2.72x10 ⁻⁴
4	1.645701x10 ⁻¹	5.369615x10 ⁻¹²	1.48x10 ⁻⁸	2.85x10 ⁻²	2.62x10 ⁻⁸	4	9.566266x10 ⁻¹	1.609839x10 ⁻³	2.13x10 ⁻⁶	2.72x10 ⁻⁴	1.06x10 ⁻⁵
5	2.342542x10 ⁻¹	1.794500x10 ⁻¹	6.25x10 ⁻⁹	6.60x10 ⁻⁸	2.62x10 ⁻⁸	5	9.703386x10 ⁻¹	1.656768x10 ⁻³	9.01x10 ⁻⁸	9.54x10 ⁻⁶	3.93x10 ⁻⁶
6	6.303772x10 ⁻¹	1.316391x10 ⁻¹	2.27x10 ⁻⁹	2.80x10 ⁻⁸	2.62x10 ⁻⁸	6	1.062514x10 ⁰	2.515997x10 ⁻¹¹	4.43x10 ⁻¹³	4.39x10 ⁻⁷	3.86x10 ⁻⁶
7	2.661404x10 ⁻¹	2.961339x10 ⁻²	3.90x10 ⁻¹⁰	1.01x10 ⁻⁸	2.62x10 ⁻⁸	7	8.852649x10 ⁻¹	8.068420x10 ⁻³	3.21x10 ⁻¹⁴	1.90x10 ⁻¹²	3.86x10 ⁻⁶
8	1.916686x10 ⁻¹	1.359396x10 ⁻¹	1.44x10 ⁻¹⁰	1.75x10 ⁻⁹	2.62x10 ⁻⁸	8	1.092517x10 ⁰	4.454385x10 ⁻³	3.03x10 ⁻¹⁵	1.44x10 ⁻¹³	3.86x10 ⁻⁶
9	2.963279x10 ⁻¹	1.610823x10 ⁻¹¹	5.78x10 ⁻¹⁶	6.44x10 ⁻¹⁰	2.62x10 ⁻⁸	9	9.818879x10 ⁻¹	5.092997x10 ⁻³	1.70x10 ⁻¹⁸	1.36x10 ⁻¹⁴	3.86x10 ⁻⁶
10	3.462794x10 ⁻¹	5.090701x10 ⁻¹	4.12x10 ⁻¹⁶	2.58x10 ⁻¹⁵	2.62x10 ⁻⁸	10	9.223193x10 ⁻¹	2.219261x10 ⁻³	9.04x10 ⁻¹⁸	7.62x10 ⁻¹⁶	3.86x10 ⁻⁶
11	4.527206x10 ⁻¹	1.611643x10 ⁻²	5.24x10 ⁻¹⁷	1.84x10 ⁻¹⁵	2.62x10 ⁻⁸	11	1.055205x10 ⁰	2.150651x10 ⁻³	4.36x10 ⁻¹⁹	4.04x10 ⁻¹⁷	3.86x10 ⁻⁶
12	2.643670x10 ⁻¹	2.954267x10 ⁻²	9.00x10 ⁻¹⁸	2.34x10 ⁻¹⁶	2.62x10 ⁻⁸	12	9.814707x10 ⁻¹	8.005721x10 ⁻⁴	1.50x10 ⁻²⁰	1.95x10 ⁻¹⁸	3.86x10 ⁻⁶
13	2.547266x10 ⁻¹	2.153084x10 ⁻¹	4.10x10 ⁻¹⁸	4.02x10 ⁻¹⁷	2.62x10 ⁻⁸	13	1.076589x10 ⁰	5.550826x10 ⁻¹⁰	2.56x10 ⁻²⁵	6.71x10 ⁻²⁰	3.86x10 ⁻⁶
14	2.114347x10 ⁻¹	6.617158x10 ⁻¹¹	3.40x10 ⁻²³	1.87x10 ⁻¹⁷	2.62x10 ⁻⁸	14	8.581904x10 ⁻¹	2.610629x10 ⁻³	1.24x10 ⁻²⁸	1.14x10 ⁻²⁴	3.86x10 ⁻⁶
15	5.991071x10 ⁻¹	6.612512x10 ⁻¹	2.76x10 ⁻²³	1.52x10 ⁻²²	2.62x10 ⁻⁸	15	1.136739x10 ⁰	2.478924x10 ⁻³	7.67x10 ⁻²⁸	5.57x10 ⁻²⁰	3.86x10 ⁻⁶
16	2.635013x10 ⁻¹	3.456640x10 ⁻³	1.62x10 ⁻²⁴	1.24x10 ⁻²²	2.62x10 ⁻⁸	16	9.577614x10 ⁻¹	4.939709x10 ⁻³	4.64x10 ⁻²⁹	3.43x10 ⁻²⁷	3.86x10 ⁻⁶
17	2.749004x10 ⁻¹	0.203025x10 ⁻²	4.67x10 ⁻²⁵	7.26x10 ⁻²⁴	2.62x10 ⁻⁸	17	9.370781x10 ⁻¹	2.117210x10 ⁻³	2.70x10 ⁻³⁰	2.00x10 ⁻²⁸	3.86x10 ⁻⁶
18	2.124916x10 ⁻¹	1.365337x10 ⁻¹	1.73x10 ⁻²⁵	2.09x10 ⁻²⁴	2.62x10 ⁻⁸	18	1.037055x10 ⁰	2.391438x10 ⁻³	1.23x10 ⁻³¹	1.24x10 ⁻²⁹	3.86x10 ⁻⁶

表5 $A_3 x = b_3$ に対するCG法における α_k, β_k , 残差ノルム初期値 $x_0^T = (\text{random})$ 表6 $A_3 x = b_3$ に対するICCG法における α_k, β_k , 残差ノルム初期値 $x_0^T = (\text{random})$