

行列問題に対する Lanczos 法と共役勾配法

慶大工学部 高橋 秀俊
野寺 隆

固有値問題を解くための Lanczos 法, 一次方程式を解くための共役勾配法 (CG 法) は, いずれも行列 A を保存したまま計算する方法であるために, 大型疎行列に対して有利であることから, 最近特に注目されている. 上記のような共通点はこの二つの方法の間に密接な関係があることを示唆するものであり, そのことはいくつかの文献によって周知であるが, 国内ではまだこのことを明示した文献は少ないようである. 本文では, この両者の間の関連を明確にし, またこれらの方法に共通な, やや理解しにくい面に解説を加えて, Lanczos 法, CG 法をめぐる“地理”を明らかにすることを試みたい.

1. Lanczos 法と CG 法の同等性.

Lanczos 法の手続きは, いくつかの変種はあるが, 適宜に選んだ初期ベクトル u_0 から出発して, 3項漸化式

$$(1) \quad \beta_k u_{k+1} = (A - \alpha_k) u_k - \beta_{k-1} u_{k-1},$$

$$\text{ただし} \quad \beta_{-1} = 0,$$

$$\alpha_k = u_k \cdot A u_k,$$

$$\beta_k = |(A - \alpha_k) u_k - \beta_{k-1} u_{k-1}|$$

によって正規化直交ベクトル系列 $u_0, u_1, u_2, \dots$ を求めることであり、それは本質的には u_0 に A を累乗して得られる系列 $u_0, A u_0, A^2 u_0, \dots$ に対して Gram-Schmidt の直交化を行なったことと同等である。そして

$$(2) \quad A u_k = \beta_{k-1} u_{k-1} + \alpha_k u_k + \beta_k u_{k+1}$$

であるから、 $u_0, u_1, u_2, \dots$ を新しい座標軸にとると、 A は 3 重対角行列となる。このことを利用して固有値問題が解かれるわけである。

つぎに CG 法のアルゴリズムでは、初期試行ベクトル x_0 (0 でもよい) に対する残差 $r_0 = b - A x_0$ から出発して、2 段階の漸化式

$$(3) \quad \begin{aligned} p_k &= p_{k-1} + \mu_k r_k, & \mu_k &= 1/r_k^2; \\ r_{k+1} &= r_k - \lambda_k A p_k, & \lambda_k &= 1/(p_k \cdot A p_k). \end{aligned}$$

$$(\text{ただし } p_{-1} = 0)$$

によって $p_0, r_1, p_1, r_2, \dots$ を順に求めていく。実際はこのほかに、解 x を求めるための計算

$$(3') \quad x_{k+1} = x_k + \lambda_k p_k$$

を並行して行なう必要があるが、これはアルゴリズムの立場からは“副産物”である.*

上のアルゴリズムを見れば、 r_k は結局は r_0 に A のある k 次多項式 $R_k(A)$ を作用させたもの

$$(4) \quad r_k = R_k(A) r_0$$

であることがわかる。しかも系列 $r_0, r_1, r_2, \dots$ は(非正規化)直交系列であることが示されるから、 r_0 を前記 u_0 に対応させるならば、 r_k と u_k とは正規化因子を除いて同一でなければならない。実際

$$(5) \quad r_k = (-1)^k |r_k| u_k = (-1)^k u_k / \sqrt{\mu_k}$$

という関係がある。これが Lanczos 法と CG 法との基本的な関係である。

2. Lanczos 法と CG 法の相互代替

Lanczos 法と CG 法は、一方は固有値問題のため、他方は一次方程式を解くために開発されたものであるが、上のように互に同等であることがわかってみれば、それらは互に代替可能である筈である。その点について検討してみよう。

2a. 固有値問題を CG 法で解く。

この場合、Lanczos 法の定数 α_k, β_k が CG 法の定数 λ_k ,

*以上の式は通常流布されているものとは p_k の定義(スケール)が違う。戸川氏が“高橋版”と呼んでいるものである。

μ_k であらわされればよい.

$$\alpha_k = u_k \cdot A u_k, \quad \beta_k = u_{k+1} \cdot A u_k$$

に (5) を代入し, 更に (3) を利用して変形することにより, 容易に

$$(6) \quad \alpha_k = \frac{1}{\mu_k} \left(\frac{1}{\lambda_{k-1}} + \frac{1}{\lambda_k} \right), \quad \beta_k = \frac{1}{\lambda_k \sqrt{\mu_k \mu_{k+1}}}$$

が得られる. したがって, 固有値問題は CG 法のアプローチによっても解ける. これは, 同じ行列 A に対して固有値問題と 1 次方程式の両方を解きたいときは役立つであろう. しかしそれ以外の場合は, 特に CG 法アプローチを用いることの利点は見当たらない.

2b. 一次方程式を Lanczos 法で解く.

この目的には Lanczos 法の行列要素 α_k, β_k から, 逆に λ_k, μ_k を求めればよい. 関係 (6) を λ_k, μ_k について解くと

$$(7) \quad \frac{1}{\lambda_k} = \alpha_k \mu_k - \frac{1}{\lambda_{k-1}}, \quad \mu_{k+1} = \frac{1}{\beta_k^2 \lambda_k^2 \mu_k}$$

となって, λ_k, μ_{k+1} に対する漸化式の形をしているから, $\lambda_{-1} = \infty, \mu_0 = 1/r_0^2$ から出発して μ_k, λ_k をすべて求めることができる. そこで関係 (5) を考慮しつつ (3), (3') を適用すると,

$$(8) \quad \begin{aligned} p_k &= - \sum_{i=0}^k (-1)^{k-i} \sqrt{\mu_i} u_i, \\ x_k &= - \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i p_i \end{aligned}$$

によって解への近似列 $x_0, x_1, x_2, \dots$ が得られる.

しかしこれではCG法を単にそのままの形で、むりやりに Lanczos のアルゴリズムにつないだに過ぎず、Lanczos 法の思想にそぐわない. もっと Lanczos 法の考え方に密着した方法はないだろうか.

それには生成多項式の理論に立って考えるのがよい. すると, Lanczos 法の基底ベクトル u_k , CG法のベクトル r_k, p_k, x_k はそれぞれ生成多項式 U_k, R_k, P_k, X_k によって, 共通なベクトル u_0 から

$$(9) \quad \begin{aligned} u_k &= U_k(A) u_0, & r_k &= R_k(A) u_0, \\ p_k &= P_k(A) u_0, & x_k &= X_k(A) u_0 + x_0 \end{aligned}$$

のようにして導かれる. ここで (1) により, U_k は漸化式

$$(10) \quad \beta_k U_{k+1} = (\xi - \alpha_k) U_k - \beta_{k-1} U_{k-1}$$

をみたす. ここに ξ は多項式 $U_k(\xi)$ の独立変数として (1) の A のかわりに形式的に導入したものである.

ここでこの形式的変数に具体的な数値を与えても (10) は当然成り立つから, $\xi = 0$ と置くと

$$(11) \quad \beta_k U_{k+1}(0) = -\alpha_k U_k(0) - \beta_{k-1} U_{k-1}(0).$$

また (3) の下段の式に相当する式は

$$(12) \quad R_{k+1} = -\lambda_k \xi P_k + R_k$$

となるから, ここで $\xi = 0$ と置くと,

$$(13) \quad R_k(0) = R_{k-1}(0) = R_{k-2}(0) = \dots = R_0$$

となる. つまり多項式 $R_k(\xi)$ の定数項はすべて等しい.

ここで関係 (5) によって $U_k = (-1)^k \sqrt{\mu_k} R_k$ だから,

$$(14) \quad U_k(0) = (-1)^k \sqrt{\mu_k} R_k(0) = (-1)^k \sqrt{\mu_k} R_0$$

これを (11) に入れると $\sqrt{\mu_k}$ に対する漸化式

$$(15) \quad \beta_k \sqrt{\mu_{k+1}} = \alpha_k \sqrt{\mu_k} - \beta_{k-1} \sqrt{\mu_{k-1}}$$

を得る. また (2) で右辺にだけ (5) を適用し, そして $r_k = b - Ax_k$ を用いると,

$$Au_k = \alpha_k \sqrt{\mu_k} (b - Ax_k) - \beta_{k-1} \sqrt{\mu_{k-1}} (b - Ax_{k-1}) - \beta_k \sqrt{\mu_{k+1}} (b - Ax_{k+1}).$$

ここで (15) により, 右辺の b の項は消えるから

$$Au_k = -\alpha_k \sqrt{\mu_k} Ax_k + \beta_{k-1} \sqrt{\mu_{k-1}} Ax_{k-1} + \beta_k \sqrt{\mu_{k+1}} Ax_{k+1}$$

ここで A は特異でないとして A を取り除き, 移項すると,

$$(16) \quad \beta_k \sqrt{\mu_{k+1}} x_{k+1} = \alpha_k \sqrt{\mu_k} x_k - \beta_{k-1} \sqrt{\mu_{k-1}} x_{k-1} + u_k$$

を得る. そこで, (15) から $\sqrt{\mu_k}$ を定め, 2 階の差分方程式

(16) によって x_k を求めることができる.

なお, (15) は (6) から λ_k を消去することによっても得られ, (16) はその結果を (8) に代入することによっても得られるが, これらが Lanczos 法の漸化式 (1) と同じ形式をもっているという点は, 上のような導出によってはじめて理解されられると思われる.

一次方程式を解くのに Lanczos 法を用いることは一つの

利点がある。すなわち、 A が正定値でない場合、CG 法では $\lambda_k = 1/(p_k^T A p_k)$ の分母が 0 になって計算を進められなくなることがあり得る。Lanczos 法ではその危険がない。

漸化式 (15) によると、 $\sqrt{\mu_{k+1}}$ は Lanczos 行列の小行列式

$$(17) \quad \Delta_k = \begin{vmatrix} \alpha_0 & \beta_0 & & 0 \\ \beta_0 & \alpha_1 & \beta_1 & \\ & \beta_1 & \alpha_2 & \ddots \\ & & \ddots & \beta_{k-1} & \alpha_k \\ 0 & & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{vmatrix}$$

と

$$(18) \quad \Delta_k = \beta_0 \beta_1 \cdots \beta_k \sqrt{\mu_{k+1}}$$

の関係にある。さて、CG 法で $\lambda_k = \infty$ のときは $\mu_{k+1} = 0$ ，したがって $\Delta_k = 0$ となる。つまり Lanczos 行列の首座小行列式の一つが 0 になると CG 法は行き詰まるが、Lanczos プロセスと (16) を使い、そして $\sqrt{\mu_k} x_k$ を一まとめにして扱う限り、 $\Delta_k = 0$ となっても困難は起こらない。分母が 0 になることがないということは、同時に桁落ちによる精度の低下がないということと考えるとよいから、Lanczos 法の方が計算の安定性がよいと考えてもよいであろう。

3. 直交性の伝播

Lanczos 法も CG 法も、その正当性は順次生成されていくベクトルの間に (理論的に) 成立する直交関係あるいはこれ

に類するものによって保証される。ところがこの直交性その他の関係は、漸化式によって前の段階での直交性から帰納的に得られる形になっており、計算の丸の誤差のために直交性が近似的にしか成立しない場合、計算プロセスの進行と共に、直交性からのはずれが累積するだけでなく、時には急速に拡大されて、近似的な直交性すら保たれなくなる。比較的小さい行列(7~8元)を扱う場合でもこのことがあらわれて、この両方法に共通な欠陥となる。つぎに、両方法での直交性の伝播の機構を明確にすることも試みる。

3a. Lanczos 法

Lanczos 法での直交性 $u_i \cdot u_j = 0$ ($i \neq j$)が出てくるのは、結局は行列 A の対称性により

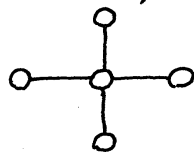
$$u_i \cdot A u_j = u_i (\beta_{j-1} u_{j-1} + \alpha_j u_j + \beta_j u_{j+1})$$

$$u_j \cdot A u_i = u_j (\beta_{i-1} u_{i-1} + \alpha_i u_i + \beta_i u_{i+1}),$$

すなわち u_i 同士の内積の間に

$$(19) \quad (\alpha_i - \alpha_j) u_i \cdot u_j + \beta_{i-1} u_{i-1} \cdot u_j + \beta_i u_{i+1} \cdot u_j - \beta_{j-1} u_i \cdot u_{j-1} - \beta_j u_i \cdot u_{j+1} = 0$$

という同次線型関係が成立することによって考えられる。これは $u_i \cdot u_j$ を i, j を縦横にとって2次元に配列した場合、図のように隣接した5個の内積の関係である。そして、そのうちの4個が0である



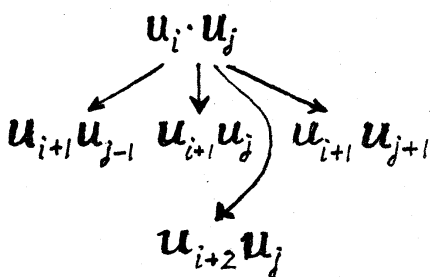
ならば、残りの1個も0である、という推論の繰返しで直交性が導かれていくのである。なおこのほかに“境界条件”に相当する関係

$$(19') \quad \beta_i u_i \cdot u_{i+1} = -\beta_{i-1} u_i \cdot u_{i-1},$$

$$(\alpha_i - \alpha_{i+1}) u_i \cdot u_{i+1} + \beta_{i-1} u_{i-1} \cdot u_{i+1} - \beta_{i+1} u_i \cdot u_{i+2} + \beta_i (u_{i+1}^2 - u_i^2) = 0$$

がある。これらから帰納的に、まず $u_i \cdot u_{i+1} = 0$, $u_i \cdot u_{i+2} = 0$ が得られ、更に i, j に対する2重の帰納により、一般の関係 $u_i \cdot u_j = 0$ ($i \neq j$) が得られる。

(19), (19')等の関係はまた、それらの関係に丸めによる誤差があるとき、その誤差が伝播するデータフローをあらわす式でもある。そのような考えに従えば、データフローは一つ



の $u_i \cdot u_j$ から図のような4個の経路に沿って伝播する。その結果、"対角線"に近い $u_i \cdot u_{i+1}$ につ

いては、誤差は唯一つの経路を伝

って来るだけであるので、単純な累積はあっても異常な拡大はおこらないが、対角線から遠ざかるにつれて、一個所で生じた誤差がたくさんの経路を通して一個の $u_i \cdot u_j$ は作用するようになるために、誤差が拡大されることになる。これが Lanczos アルゴリズムで直交性が大幅に破られることの説

明である。

CG 法

CG 法での内積の関係いくつかのうち、ここでは

$$p_i \cdot r_j = \begin{cases} 1 & j \leq i \\ 0 & j > i \end{cases}$$

について考える。すると漸化式(3)の下の方の式から

$$(r_{i+1} - r_i + \lambda_i A p_i) \cdot p_j / \lambda_i = 0$$

$$(r_{j+1} - r_j + \lambda_j A p_j) \cdot p_i / \lambda_j = 0$$

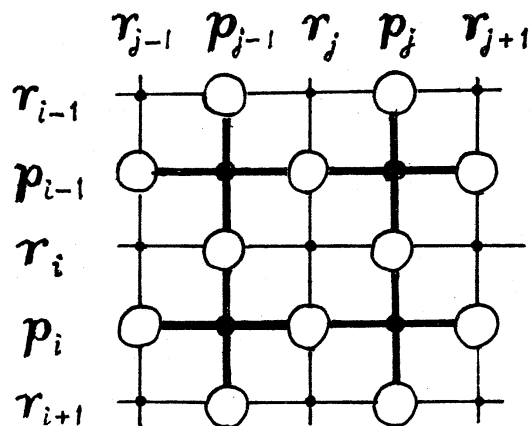
引算をして

$$(20a) \quad \frac{1}{\lambda_i} (p_j r_{i+1} - p_j \cdot r_i) - \frac{1}{\lambda_j} (p_i \cdot r_{j+1} - p_i \cdot r_j) = 0$$

同様にして(3)の上の方の式からは

$$(20b) \quad \frac{1}{\mu_i} (p_i \cdot r_j - p_{i-1} \cdot r_j) - \frac{1}{\mu_j} (p_j \cdot r_i - p_{j-1} \cdot r_i) = 0$$

が得られる。この二組の式は、 p_k, r_k を合併して $r_0, p_0, r_1, p_1, \dots, r_k, p_k, r_{k+1}, \dots$ のように一列にならべて考え、その要素間の内積を2次元に配列したとき、それらのうちで左



図で十字の線で結ばれた4個の内積の間に成り立つ関係で、図で太い十字で結ばれたものの関係は(20a)であり、細い十字で結ばれたものの関係は(20b)で

与えられることがわかる。そして、いずれの式でも、十字の先端のうちの3個の値がきまれば残る1個がきまり、Lanczos法の場合と同様、データフローは  の3方向に進行して二次元の帰納が可能になる。その結果、直交性が悪化する機構も Lanczos 法の場合と同様と考えてよからう。

4. 収束性

Lanczos 法の重要な特徴として、3重対角化のプロセスを途中でやめても、多くの場合、その部分行列について求めた固有値のいくつか（最大および最小に近いもの）は実用上十分な精度で得られることがある。一方、CG法のプロセスを途中で止めても、よい近似解が得られることが知られており、それはCG法が（ A が正値行列のとき）緩和法的一种であることから当然である。

この二つの性質も、実はたがいに密接に関連している。CG法が収束することは、 $|r_k| = 1/\sqrt{\mu_k}$ により漸化式(15)の解が k と共に急速に増大することを意味する。一方、固有値問題の収束は、対角化された方程式

$$(21) \quad \beta_{k-1} x_{k-1} + (\alpha_k - \lambda) x_k + \beta_k x_{k+1} = 0$$

を x_k に対する差分方程式と見た場合に、 λ が固有値に一致したとき解 x_k が k が増すと0に漸近することである。そしてそのような場合は、 λ が固有値に一致しないときは x_k は

逆に急激に増大する。CG法の漸化式(15)は(21)で λ を0としたものにほかならないから、この二つの性質は同じ方程式(21)の解の、 $\lambda=0$ および $\lambda \neq 0$ の場合に対する性質を問題にしていることになる。特に、最小のいくつかの固有値については、 λ は0に近いから、解が $\lambda=0$ の場合と同じ様相を呈するのが当然のことと思われる。

5. 収束の実例

つぎに、疎行列の典型的な例として、Laplace方程式のmeshにより離散化したものについて、CG法の収束の状況の実例を示そう。例1. は正方格子、5点公式による混合境界値問題の一例、例2. は三角格子、7点公式を菱形の領域に適用した例である。いずれも収束は良好である。いずれの場合にも、収束に要する時間(反復回数)は、同一の領域形状に対して、領域の面積(格子点の数)にではなく一次元的な寸法(直径)に比例している。これはCGプロセスの1反復ごとにひろがって行く一種の波が境界で反射されて出発点まで戻ってくるまでの反復回数が問題であることを物語っている。

[Laplace's equation]

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 : (x, y) \in \Gamma$$

$$(i) \quad u(x, y) = f(x, y) \in \partial\Gamma \quad (\text{第1種境界条件})$$

$$(ii) \quad \frac{\partial u}{\partial n} = g(x, y) \in \partial\Gamma \quad (\text{第2種境界条件})$$

例 1

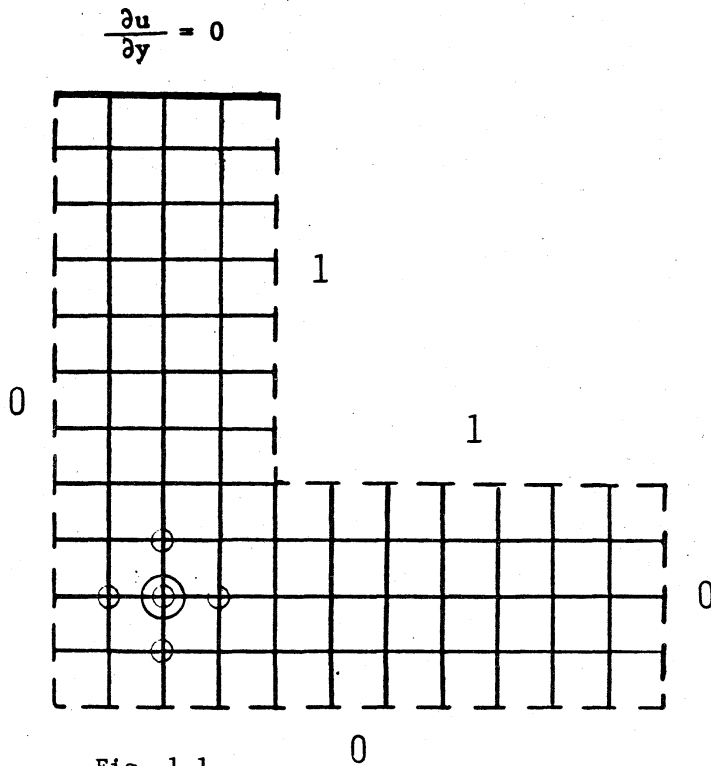


Fig. 1.1

[5-points difference equation]

$$4u(x, y) - u(x+h, y) - u(x-h, y) - u(x, y+h) - u(x, y-h) = 0$$

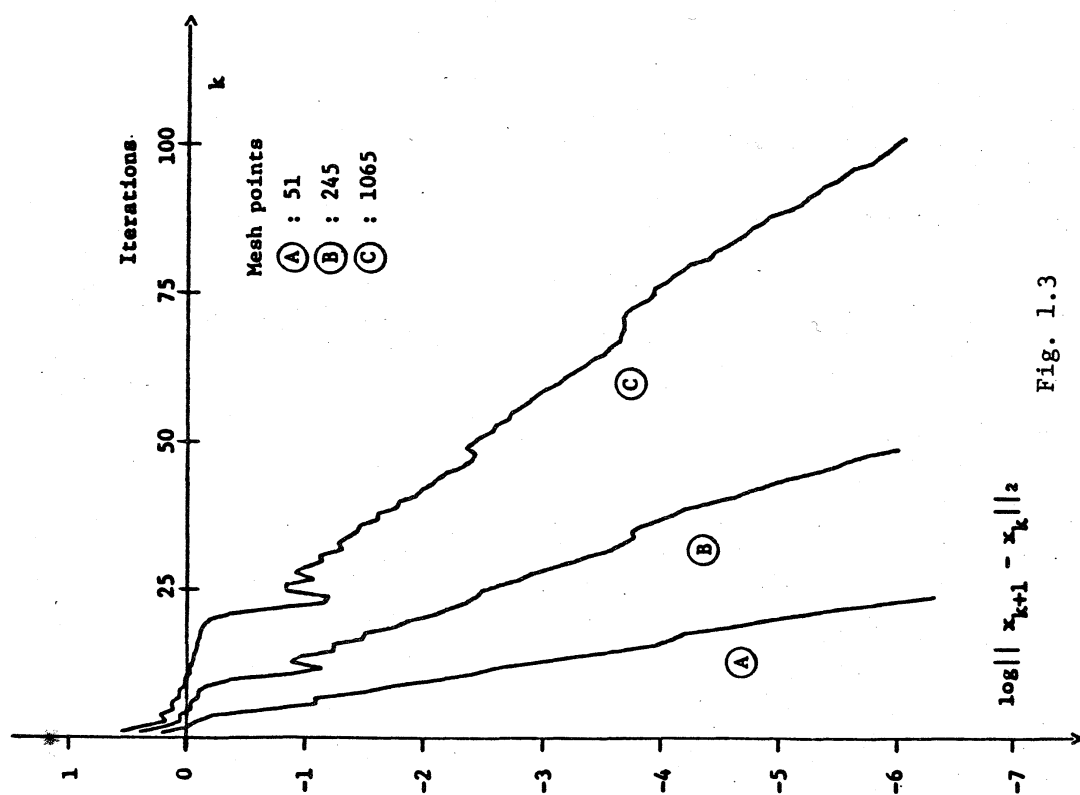


Fig. 1.2

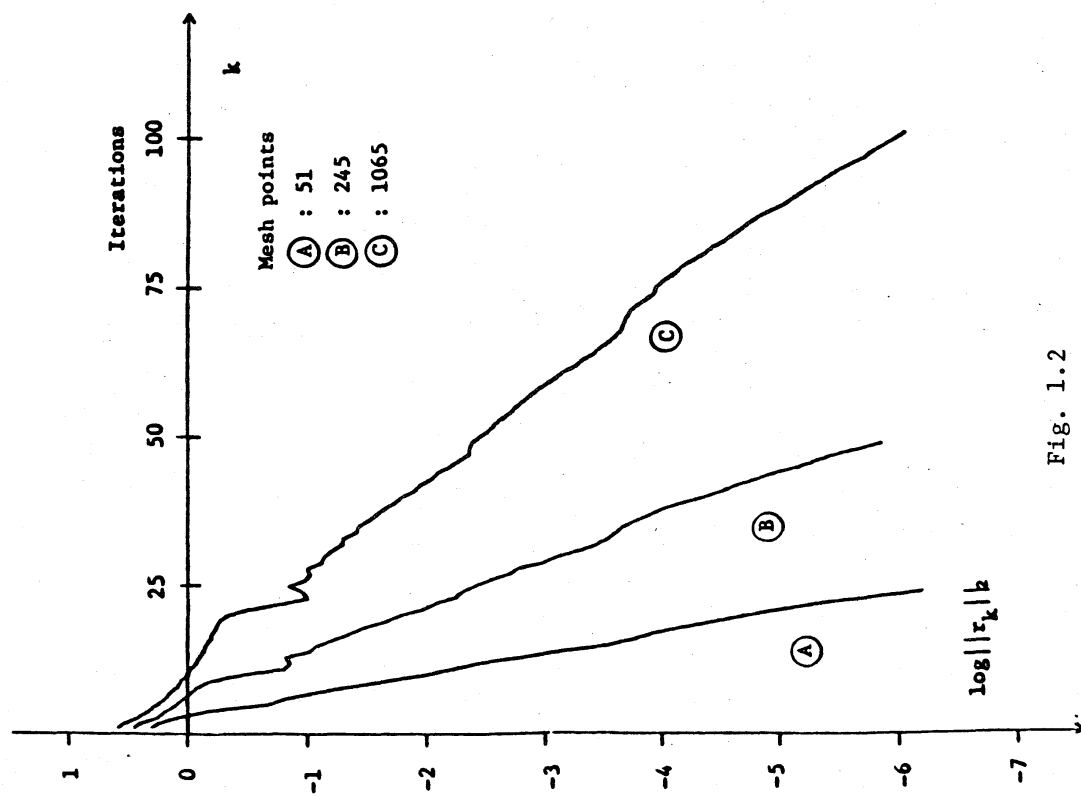


Fig. 1.3

例 2

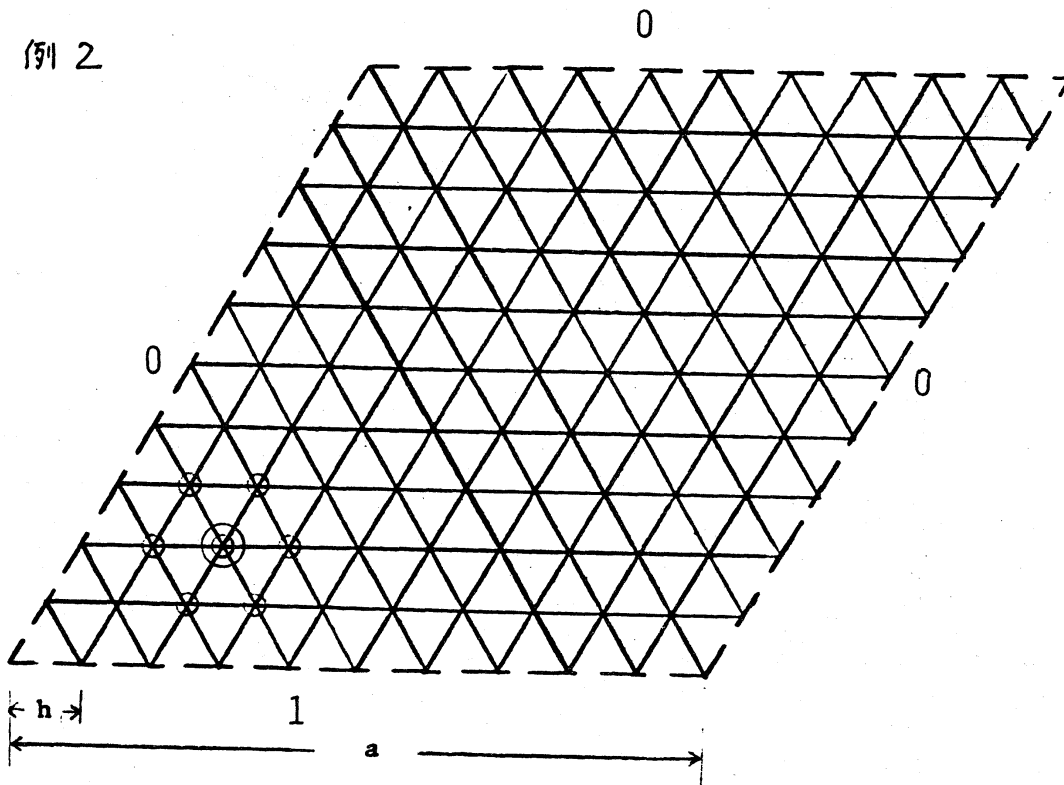


Fig. 2.1 $h = \frac{a}{M}$, h : 格子間隔, M : 格子分割数
 $n = (M - 1)^2$: 線形系のオーダ

[7-points difference equation]

$$\begin{aligned}
 &6 u(x, y) - u(x + h, y) - u(x - h, y) \\
 &- u(x - \frac{h}{2}, y + \frac{\sqrt{3}h}{2}) - u(x - \frac{h}{2}, y - \frac{\sqrt{3}h}{2}) \\
 &- u(x + \frac{h}{2}, y + \frac{\sqrt{3}h}{2}) - u(x + \frac{h}{2}, y - \frac{\sqrt{3}h}{2}) = 0
 \end{aligned}$$

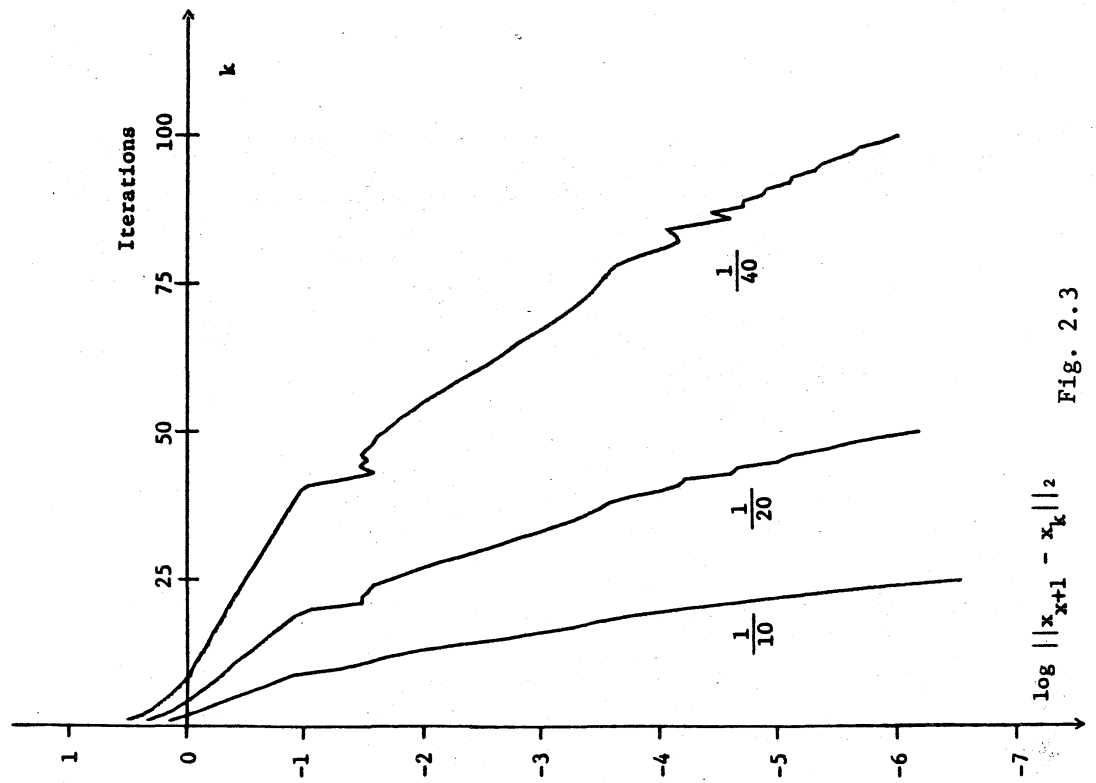


Fig. 2.3

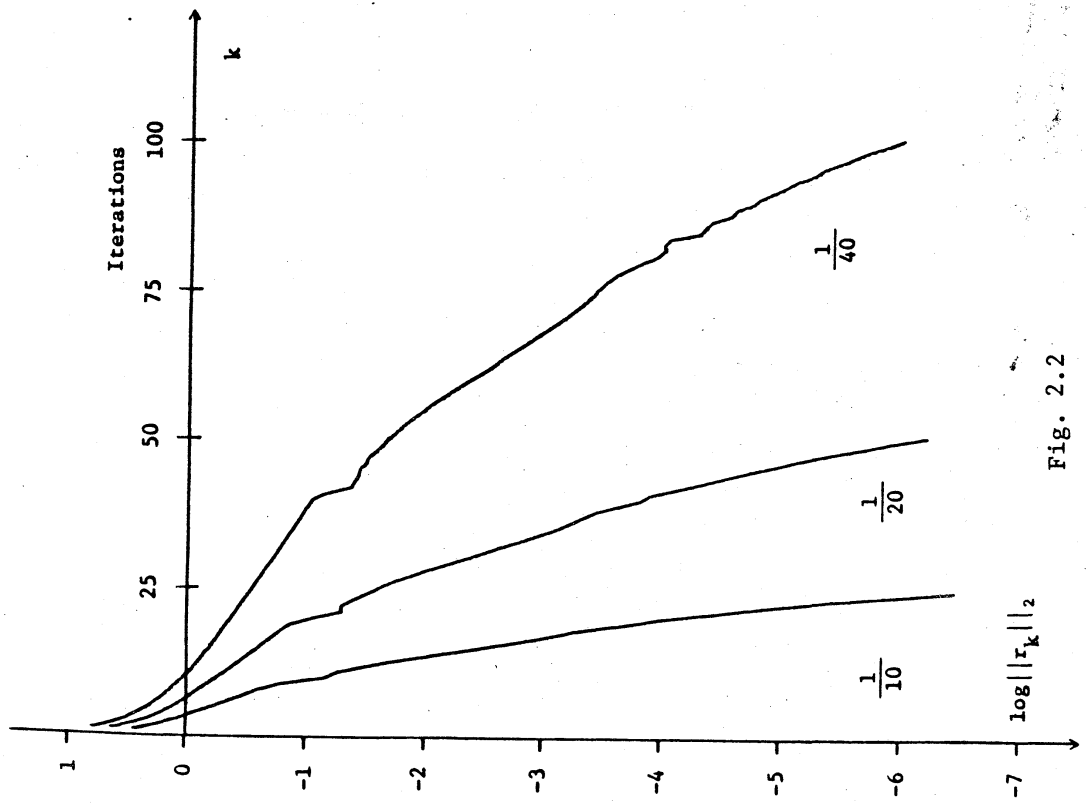


Fig. 2.2