

フィルタを利用した連立1次方程式の解法について

村上 弘^{1,a)}

概要：係数行列 A が対称で疎な連立1次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解くものとする。レゾルベントの線形結合による固有値に基づいた特性を持つフィルタ作用素 $\mathcal{F}$ を適切に作ると、任意に与えられた右辺ベクトル $\mathbf{b}$ に $\mathcal{F}$ を適用して得られる近似解 $\mathbf{x}' = \mathcal{F}\mathbf{b}$ はその残差 $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}'$ が、ある閾値より大きい固有値の固有ベクトルをほとんど含まないようにできる。そのとき、近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解からの誤差 $\delta\mathbf{x} \equiv \mathbf{x} - \mathbf{x}'$ が満たす方程式 $A\delta\mathbf{x} = \mathbf{r}$ の実効的な条件数が低下していれば、それを反復法で解く場合には比較的少ない反復回数で収束するのではないと思われる。本報告では、上記の解法の実験をいくつかの簡単な例について行った。

キーワード：連立1次方程式, 固有値, フィルタ, レゾルベント

Solution of Simultaneous Linear Equations by Using a Filter

HIROSHI MURAKAMI^{1,a)}

Abstract: We solve a system of linear equations $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ whose coefficient matrix A is symmetric and sparse. We can construct a filter operator $\mathcal{F}$ as a linear combination of resolvents whose transfer function depends only on the eigenvalue such that when $\mathcal{F}$ is applied for arbitrary given right-hand-side vector $\mathbf{b}$ to obtain an approximated solution $\mathbf{x}' = \mathcal{F}\mathbf{b}$ whose corresponding residual $\mathbf{r} \equiv \mathbf{b} - A\mathbf{x}'$ contains almost none of those eigenvectors whose values are larger than a certain threshold. Then $\delta\mathbf{x} \equiv \mathbf{x} - \mathbf{x}'$ which is the error of the approximated solution $\mathbf{x}'$ from the true solution $\mathbf{x}$ satisfies the equation $A\delta\mathbf{x} = \mathbf{r}$. If this equation to correct error had a small effective condition number, then the iterative solution method might require small number of iterations until it converged. In this report, we made experiments of the method described above on some simple examples.

Keywords: linear equation, eigenvalue, filter, resolvent

1. 構想と方針

大規模な疎行列の連立1次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を反復法で解くことを考える。今回は係数 A が対称正定値の場合とする。行列の条件数が大きい場合には反復法の収束率が低下するので、条件数を低下させるために LU 分解や不完全 LU 分解などの係数行列の変形を伴う前処理の導入が通常よく行われているが、今回の研究では反復法を用いるが、行列の分解による前処理は使わずに、以下の方針で解くことにする。

あらかじめ適切に選んだ m 個の正の実数 α_k , $k=1, 2, \dots, m$ を元の連立方程式の係数行列に対角シフトとして加えた連立方程式 $(A + \alpha_k I)\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{b}$ を反復法を用いて解いて、対応する解 $\mathbf{x}^{(k)}$ を作る。(ここでは、正定値係数の連立方程式に正の対角シフトを加えると条件数が下がるあるいは対角優位性が強まることから、反復法で解くことが極めて容易になると仮定する。今回はこの仮定の妥当性については検証をしていないが、今回の方法が有効であるためには必要な前提である。)

次に結合係数 γ_k , $k=1, 2, \dots, m$ をうまく決めることで、近似解 $\mathbf{x}' = \sum_{k=1}^m \gamma_k \mathbf{x}^{(k)}$ と真の解 $\mathbf{x}$ のそれぞれを A の固有ベクトルを用いて展開したときに、大きい固有値に対する互いの係数が極めて近い値となるようにする。

¹ 首都大学東京・数理情報科学専攻
Department of Mathematics and Information Sciences,
Tokyo Metropolitan University
^{a)} mrkmmhrsh@tmu.ac.jp

すると、いま「大きい固有値の固有ベクトル」で張られる「階数の小さい不変部分空間」を S とするとき、近似解 $\mathbf{x}'$ の残差 $\mathbf{r} := \mathbf{b} - A\mathbf{x}'$ は、 S に（近似的に）含まれる。すると、残差に対する誤差を修正するための方程式である $A\delta\mathbf{x} = \mathbf{r}$ をたとえば CG 法を用いて初期値 $\mathbf{0}$ から出発して解くと、少ない反復回数で収束するように思われる。

そのようにして $\delta\mathbf{x}$ の収束解が得られたら、元の連立 1 次方程式の最終的な近似解 $\tilde{\mathbf{x}} := \mathbf{x}' + \delta\mathbf{x}$ を作る。

2. 準備

簡単のため、連立 1 次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ は係数行列 A が疎で対称正定値とする。そのとき A の固有値は正の実数であり、固有ベクトル全体の組は空間全体を張る実の完全正規直交基底となるようにとれる。

シフト τ の A のレゾルベントは $\mathcal{R}(\tau) \equiv (A - \tau I)^{-1}$ であり、ベクトル $\mathbf{p}$ へのレゾルベントの作用 $\mathbf{u} = \mathcal{F}\mathbf{p}$ はシフト付きの連立 1 次方程式 $(A - \tau I)\mathbf{u} = \mathbf{p}$ を解いて実現する。この方程式はシフト τ の値が正の実軸から離れればそれだけ条件数が減少し、それに伴って反復法を用いて解くのが容易になるはずである。今回は、シフト τ を負の実数 $-\alpha_k$ ($\alpha_k > 0$) に限定する。

いまレゾルベントの線形結合を $\mathcal{F} = \sum_{k=1}^m \gamma_k \mathcal{R}(\tau_k)$ とすると、 A の任意の固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ に対して $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$ になりたつ。ここで有理関数 $f(\lambda) = \sum_{k=1}^m \gamma_k / (\lambda - \tau_k)$ は線形作用素 $\mathcal{F}$ の伝達関数である。逆に、有理関数 $f(\lambda) = \sum_{k=1}^m \gamma_k / (\lambda - \tau_k)$ を伝達関数とする線形作用素は、レゾルベントの線形結合 $\mathcal{F} = \sum_{k=1}^m \gamma_k \mathcal{R}(\tau_k)$ で実現できる。

3. 近似逆作用素

ある正の値 θ を閾値の目安に設定する。そうして、固有値 λ が閾値よりも大きい固有ベクトル $\mathbf{v}$ に対しては、 A の逆作用を良く近似するように作用素 $\mathcal{F}$ を構成する。つまり $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$ で、 $\lambda > \theta$ ならば $f(\lambda) \approx 1/\lambda$ であるとする。そのような近似逆作用素 $\mathcal{F}$ が構成できたら、それを用いて元の連立 1 次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を以下の手順で解く。

(1) まず、右辺 $\mathbf{b}$ に $\mathcal{F}$ を作用させて近似解 $\mathbf{x}' := \mathcal{F}\mathbf{b}$ を作る。

すると近似解 $\mathbf{x}'$ と真の解 $\mathbf{x}$ それぞれの A の固有ベクトルによる展開は、閾値 θ よりも固有値 λ がある程度大きいと、固有値 λ の同じ固有ベクトルに対する双方の展開係数の値は近い。

(2) 次に、近似解 $\mathbf{x}'$ に対する元の方程式の残差 $\mathbf{r} := \mathbf{b} - A\mathbf{x}'$ を計算して作る。

すると $\mathbf{r} = (I - A\mathcal{F})\mathbf{b}$ であるから、固有値が（閾値より）大きいベクトルで張られる不変部分空間では作用素 $\mathcal{F}$ が A の良い近似逆となっている性質から、残差 $\mathbf{r}$ には固有値が（閾値より）大きいベクトルは殆ど

含まれず、また S を固有値が（閾値より）大きいベクトルで張られた不変部分空間とすると、残差 $\mathbf{r}$ は S に（近似的に）含まれることがわかる。

(3) 残差 $\mathbf{r}$ を右辺とする解の修正のための方程式 $A\delta\mathbf{x} = \mathbf{r}$ を、たとえば反復法に CG 法を用いて初期値を $\mathbf{0}$ として解く。

不変部分空間 S の階数が小さければ（また実効的な条件数も低下していれば）、CG 法は少ない反復回数で収束して $\delta\mathbf{x}$ を与える”であろう”。

(4) 元の連立 1 次方程式の最終的な近似解を $\tilde{\mathbf{x}} := \mathbf{x}' + \delta\mathbf{x}$ として作る。

付記 上記の最初の 2 つのステップを拡張して、まず $\mathbf{r} := \mathbf{b}$, $\mathbf{x}' := \mathbf{0}$ とおいて、それに続いて、3 つの処理 $\delta\mathbf{x} := \mathcal{F}\mathbf{r}$; $\mathbf{x}' := \mathbf{x}' + \delta\mathbf{x}$; $\mathbf{r} := \mathbf{b} - A\mathbf{x}'$ の反復（残差反復）を数回行なうと、大きい固有値に対する $\mathbf{x}'$ の固有ベクトル展開の係数を改良できる。いま $\mathbf{b}$ から $\mathbf{r}$ を作る過程の作用素は $I - A\mathcal{F}$ であり、その伝達関数は $1 - \lambda f(\lambda)$ である。するとこのような残差反復を ℓ 回行う過程の伝達関数は $(1 - \lambda f(\lambda))^\ell$ である。

3.1 近似逆作用素の伝達関数の引数の尺度変換

いま有理関数 $g(t) = \sum_{k=1}^m c_k / (t - t_k)$ が領域 $t > \theta$ ($\theta > 0$) で $1/t$ の良い近似であると仮定する。そのとき、正数 μ ($\mu > 0$) を用いて $f(x) \equiv (1/\mu) g(x/\mu)$ とおけば、有理関数 $f(x)$ は領域 $x > \mu' = \mu\theta$ に於いて $1/x$ の良い近似関数となる。すると $f(x) = (1/\mu) g(x/\mu) = (1/\mu) \sum_{k=1}^m c_k / (x/\mu - t_k) = \sum_{k=1}^m c_k / (x - \mu t_k)$ だから、 $t'_k = \mu t_k$ とおくと、 $f(x) = \sum_{k=1}^m c_k / (x - t'_k)$ である。

以上から、 $g(t)$ が領域 $t > \theta$ に於いて近似逆作用素の伝達関数であるときに、その極を一齐に正数 μ ($\mu > 0$) 倍に変更すると、領域 $x > \theta' = \mu\theta$ に於ける近似逆作用素の伝達関数 $f(x)$ が得られることがわかる。つまり近似領域の閾値の拡大縮小は単にシフト（極）分布を尺度変更するだけで可能で、「固有値の小さい領域」と「固有値の大きい領域」の閾値を調整することは容易にできる。伝達関数とレゾルベントの線形結合の間の対応関係から、近似逆作用素の閾値はシフト量を尺度変換するだけで簡単に変更できることがわかる。

3.2 無限遠での展開による係数決定法

いま、伝達関数 $g(t) = \sum_{k=1}^m c_k / (t - t_k)$ の極分布が先に負の数 $t_k = -\alpha_k$, $k=1, 2, \dots, m$ で与えられているとき、極の係数 c_k , $k=1, 2, \dots, m$ をうまく決めると、無限遠 $t = \infty$ (の近傍) での展開 $g(t) - 1/t = O(t^{-(p+1)})$ の指数 p を最大値 m にできる。ただしこの場合は条件を無限遠（の近傍）だけに於いて設定しているので、近似領域の範囲（閾値）は何も指定したことはない。なお、個数 m を与えたときのシフト量の最適な分布を決定する方法は解明で

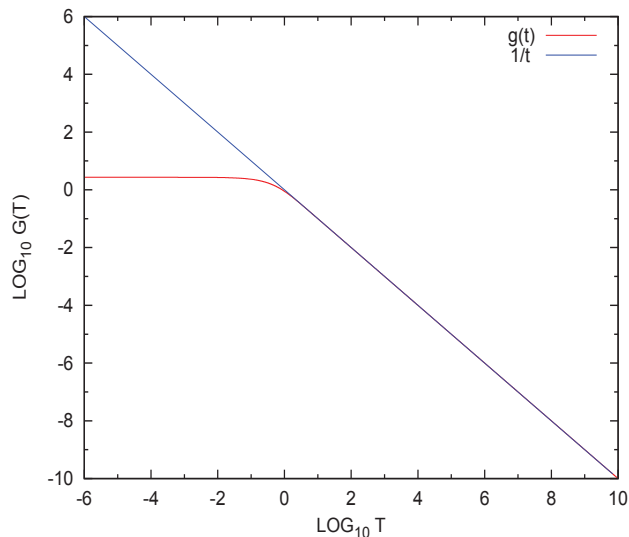


図 1 無限遠での展開による近似逆作用素：伝達関数 $g(t)$ と比較用の $1/t$ のグラフ（両対数）

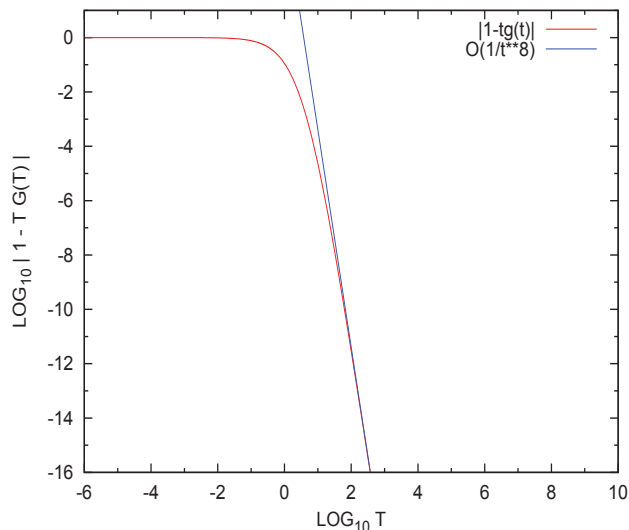


図 2 無限遠での展開による近似逆作用素：右辺から残差への伝達率の大きさ $|1 - tg(t)|$ のグラフ（両対数）

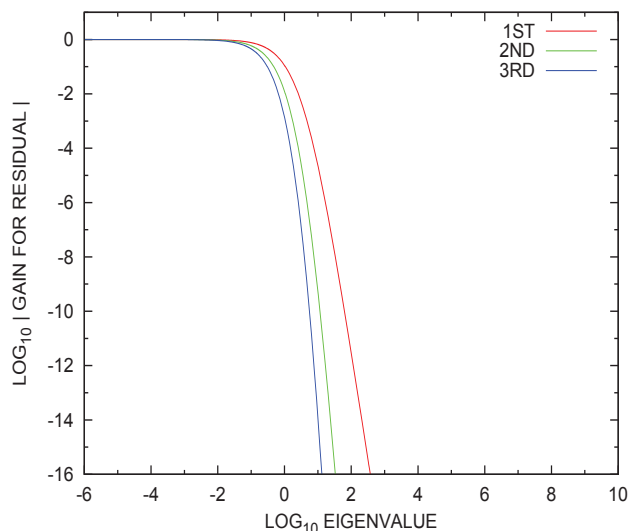


図 3 無限遠での展開による近似逆作用素：残差反復の伝達率の大きさ $|1 - tg(t)|^l$ のグラフ（両対数）

きていない。

いま V を要素が $v_{i,j} = \alpha_j^{i-1}$, $i, j=1, 2, \dots, m$ である Vandelmonde 行列とし, $\mathbf{c}$ を要素が c_k , $k=1, 2, \dots, m$ であるベクトルとし, $\mathbf{h}$ を要素が $h_j = \delta_{j,1}$, $j=1, 2, \dots, m$ であるベクトルとする ($\delta_{i,j}$ は Kronecker 記号). そうして m 元連立 1 次方程式 $V\mathbf{c} = \mathbf{h}$ を解いて係数のベクトル $\mathbf{c}$ を求めるが, それには Vandelmonde 行列を係数とする方程式に対する専用の解法 [1] を用いる。

例として $m=8$ 個の (逆符号の) シフトを $\alpha_k=k$ と設定した場合は, この方法で結合係数 c_k を決めると, $c_1 = 8$, $c_2 = -28$, $c_3 = 56$, $c_4 = -70$, $c_5 = 56$, $c_6 = -28$, $c_7 = 8$, $c_8 = -1$ となる. この方法で得られたフィルタの伝達関数 $g(t)$ と $|1 - tg(t)|$ を両対数でプロットしたグラフを図 1, 図 2 に掲げる. 図 1 のグラフは, 伝達率 $g(t)$ とそれと比較するための $1/t$ をプロットしたものであり, 図 2 のグラフは, 右辺ベクトル $\mathbf{b}$ が含む固有ベクトルから残差 $\mathbf{r}$ の含む固有ベクトルへの伝達率の大きさ $|1 - tg(t)|$ と, その傾きを比較するための $O(1/t^m) = O(1/t^8)$ の両者をプロットしたものである. 残差の固有ベクトル展開の係数は, 固有値の正規化座標 t が少し大きくなると, t の $m(=8)$ 乗に反比例して減衰する. さらに図 3 のグラフは, 残差反復の伝達率 $(1 - tg(t))^l$ である. これは反復回数 $l = 1, 2, 3$ の各場合について, 右辺 $\mathbf{b}$ が含む固有ベクトルが残差 $\mathbf{r}$ では何倍に変わるか (伝達率) をそれぞれプロットしたものである。

3.3 無限遠での展開による係数決定法 (別解法)

Vandelmonde 方程式を用いずに係数を決める方法を示す. 伝達関数 $g(t)$ の $1/t$ からの誤差は $g(t) - 1/t = \sum_{k=1}^m c_k / (t - t_k) - 1/t = P(t) / \{t \prod_{k=1}^m (t - t_k)\}$, ただし $P(t)$ はある高々 m 次の多項式である. そうして誤差の大きさが遠方で最も急減少するのは $P(t)$ が定数になる場合である. その場合の定数を γ とすると, 上式の両辺に $t \prod_{j=1}^m (t - t_j)$ を乗じると, $t \sum_{k=1}^m c_k \prod_{j=1, j \neq k}^m (t - t_j) - \prod_{j=1}^m (t - t_j) = \gamma$ となる. すると $t=0$ からは式 $\gamma = -\prod_{j=1}^m (-t_j)$ が, $t=t_k$ からは式 $c_k = \gamma / \{t_k \prod_{j \neq k} (t_k - t_j)\}$ が得られ, 整理すると式 $c_k = 1 / \prod_{j=1, j \neq k}^m (1 - t_k/t_j)$ が得られる (分点 t_j が複素数の場合でも議論は全く同様に成立する). この方法では, 簡単な数式の計算により求めたい係数が求められる。

なお遠方での振る舞いから $\sum_{k=1}^m c_k = 1$ であり, また $1 - tg(t) = -\sum_{k=1}^m c_k t_k / (t - t_k) = -\gamma / \prod_{k=1}^m (t - t_k)$ である。

3.4 最小 2 乗法による係数決定法

近似領域を $[1, \infty)$ に規格化した伝達関数 $g(t) = \sum_{k=1}^m c_k / (t - t_k)$ を考える. その m 個の極として負数 $t_k = -\alpha_k (< 0)$, $k=1, 2, \dots, m$ を与える。

いま $g(t) \approx 1/t$ により区間 $t \in [1, \infty)$ に於ける重み

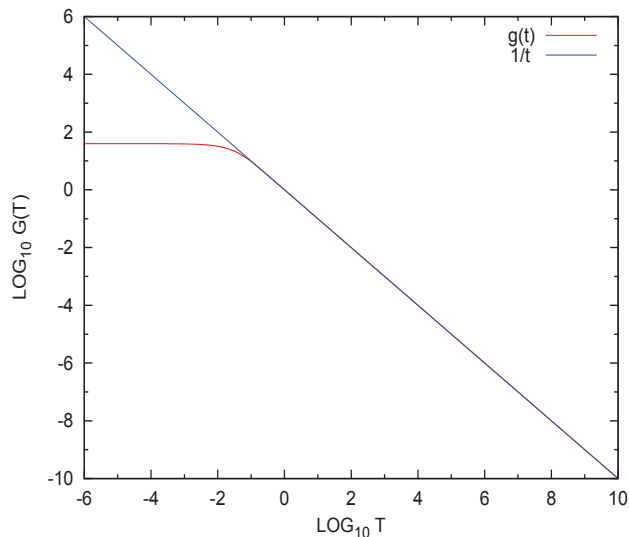


図 4 最小 2 乗法による近似逆作用素：伝達関数 $g(t)$ と比較用の $1/t$ のグラフ（両対数）

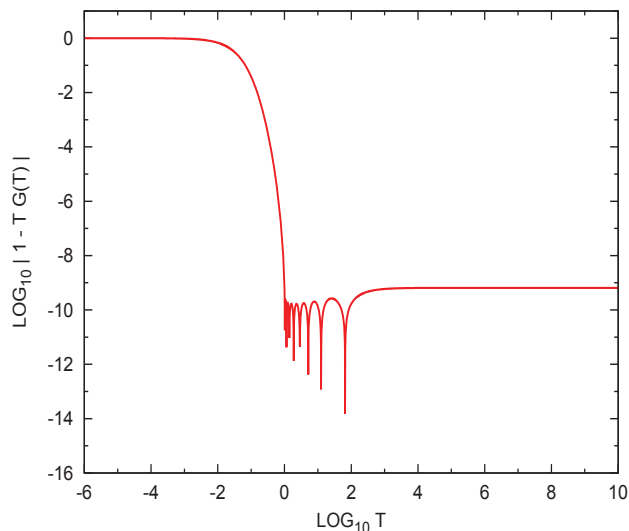


図 5 最小 2 乗法による近似逆作用素：右辺ベクトルから残差への伝達率の大きさ $|1 - tg(t)|$ のグラフ（両対数）

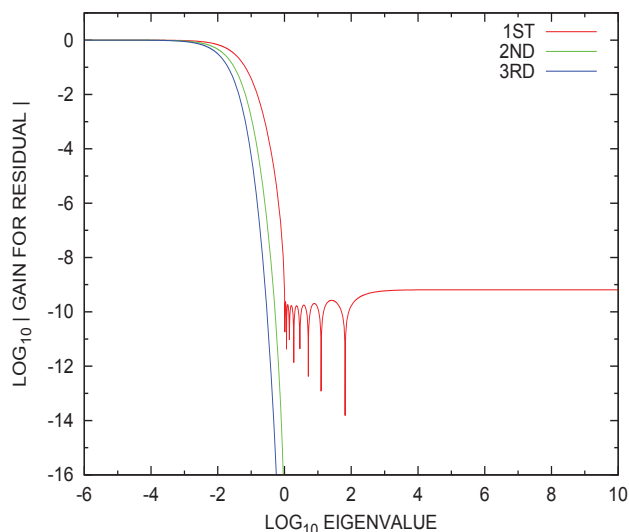


図 6 最小 2 乗法による近似逆作用素：残差反復の伝達率の大きさ $|1 - tg(t)|^l$ のグラフ（両対数）

$w(t) = 1$ による最小 2 乗近似を表すとすれば、近似誤差のノルムの 2 乗は $K = \int_1^\infty \{1/t - \sum_{k=1}^m c_k/(t + \alpha_k)\}^2 dt$ であり、その最小化条件は $0 = S_{i,i} c_i + \sum_{j=1}^m (\neq i) S_{i,j} c_j - \beta_i$ となる。行列 S の要素は $S_{i,i} = 1/(1 + \alpha_i)$, $i \neq j$ のときは $S_{i,j} = S_{j,i} = \log \{(1 + \alpha_i)/(1 + \alpha_j)\} \cdot 1/(\alpha_i - \alpha_j)$ であり、また $\beta_i = \log(1 + \alpha_i) \cdot 1/\alpha_i$ である。いま $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_m)^T$ とし、 $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m)^T$ とすると、最小化条件は m 次対称行列 S を係数とする線形方程式 $S\mathbf{c} = \beta$ になる。この方程式を解くことで係数を並べたベクトル $\mathbf{c}$ を求めるが、対称行列 S の条件数は大きくなりがちなので、Jacobi 法で丁寧に固有分解し、「切断正則化」を入れて解く必要がある。例として、 $m = 8$ 個のシフトを $t_k = -1/k$, $k=1, 2, \dots, m$ とした場合に最小 2 乗近似 $g(t) \approx 1/t$ により、係数 c_k を四倍精度演算を用いて決定した（表 1）。

表 1 最小 2 乗法で決定した極とその係数 ($m = 8$)

k	t_k	c_k
1	-1	$-3.3875771290082833 \times 10^{-3}$
2	-1/2	$8.7868309423995650 \times 10^{-1}$
3	-1/3	$-2.7808589549870721 \times 10^1$
4	-1/4	$2.6826926266110036 \times 10^2$
5	-1/5	$-1.0891179004145001 \times 10^3$
6	-1/6	$2.0976352310575689 \times 10^3$
7	-1/7	$-1.8989246750689153 \times 10^3$
8	-1/8	$6.5007137579685536 \times 10^2$

得られたフィルタの伝達関数 $g(t)$ と $|1 - tg(t)|$ の両対数グラフを図 4、図 5 に掲げる。図 5 をみると、領域 $t > 1$ に於いて $|1 - tg(t)|$ が極めて小さくなることがわかる。また、近似逆作用素 $\mathcal{F}$ による残差反復を行なう場合、右辺ベクトル中の固有ベクトルが反復後の残差ベクトルで何倍に変わるかを、反復が 1 回、2 回、3 回それぞれの場合について図 6 にプロットした。

付記 $t \in [1, \infty)$ での最小 2 乗近似は、 $g(t) - 1/t \approx 0$ であるよりも $1 - tg(t) \approx 0$ の方が適切であるかもしれないが、これについてはまた別の機会に検討する。

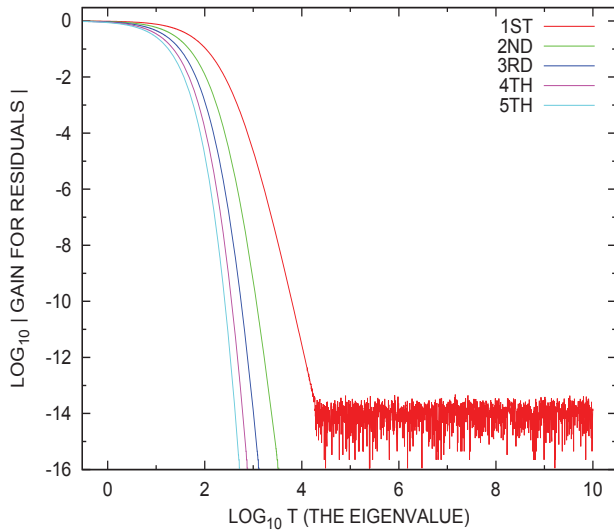


図 7 実験例 1. フィルタの反復と残差の伝達率

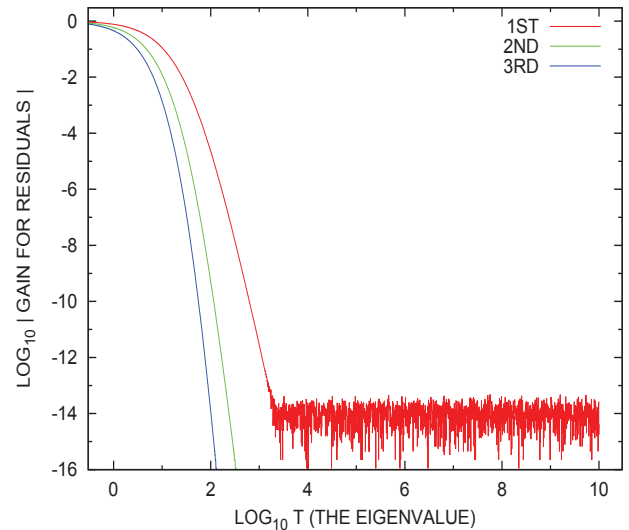


図 10 実験例 2. フィルタの反復と残差の伝達率

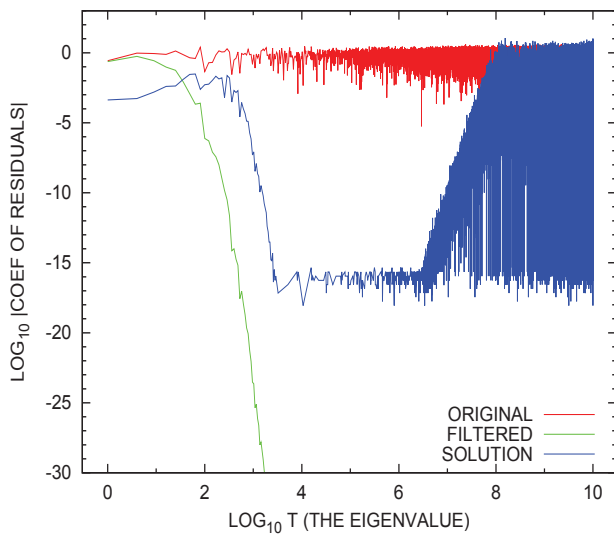


図 8 実験例 1. 各残差の固有ベクトル展開の係数

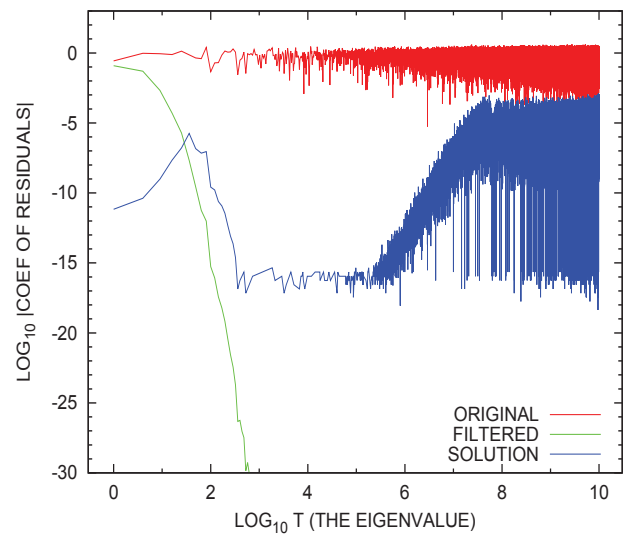


図 11 実験例 2. 各残差の固有ベクトル展開の係数

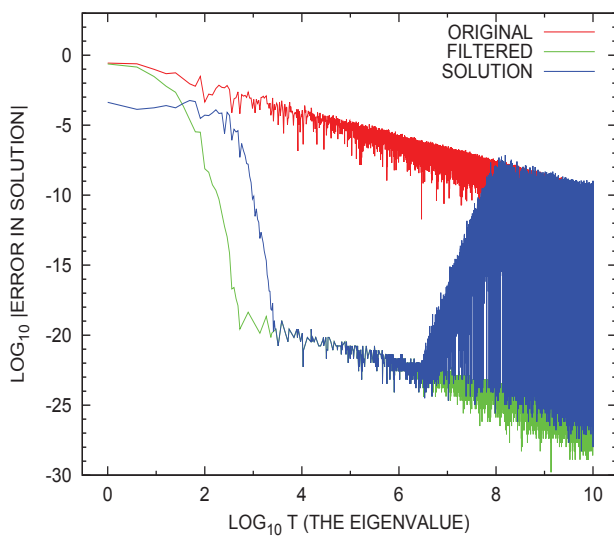


図 9 実験例 1. 各解の誤差の固有ベクトル展開の係数

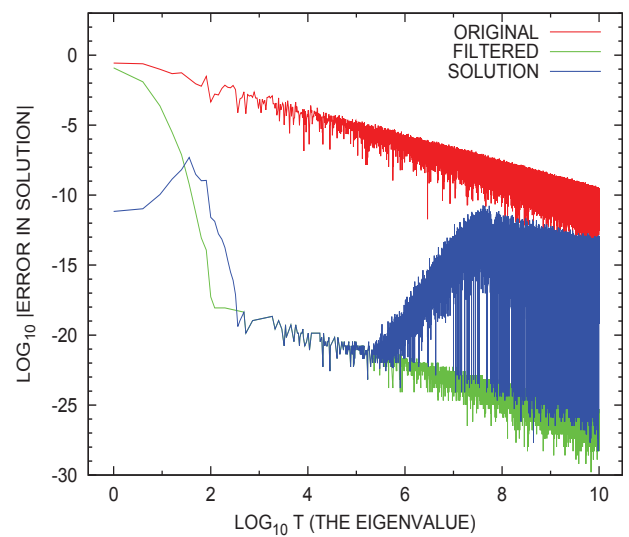


図 12 実験例 2. 各解の誤差の固有ベクトル展開の係数

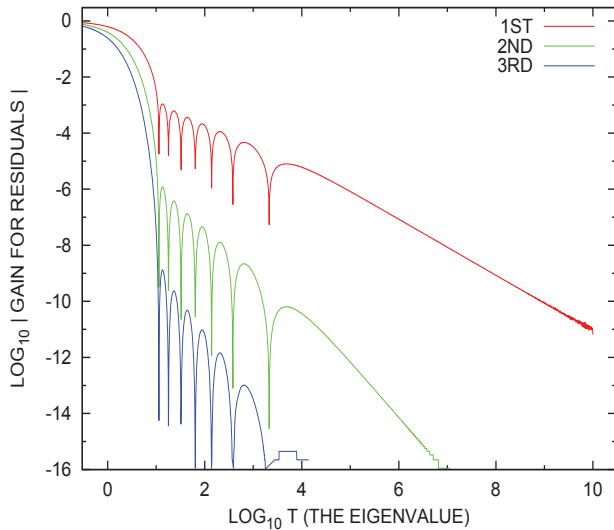


図 13 実験例 3. フィルタの反復と残差の伝達率

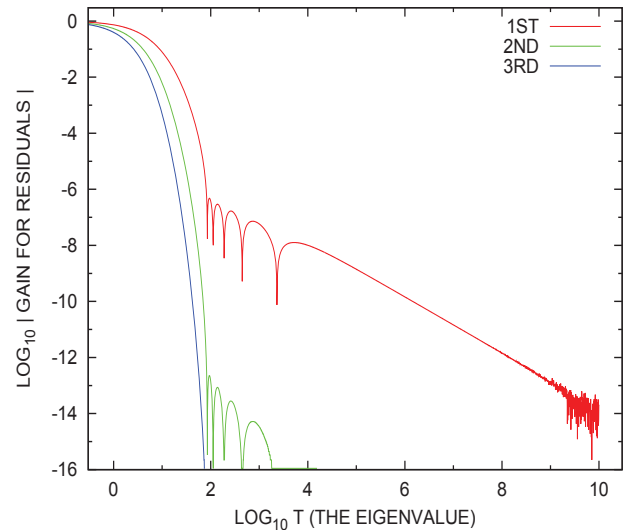


図 16 実験例 4. フィルタの反復と残差の伝達率

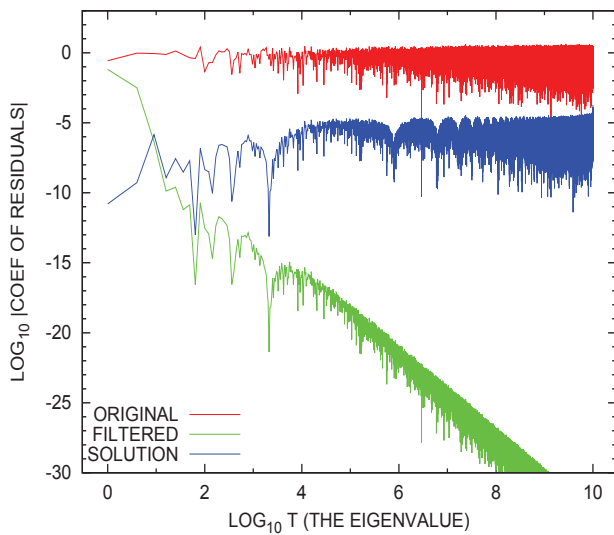


図 14 実験例 3. 各残差の固有ベクトル展開の係数

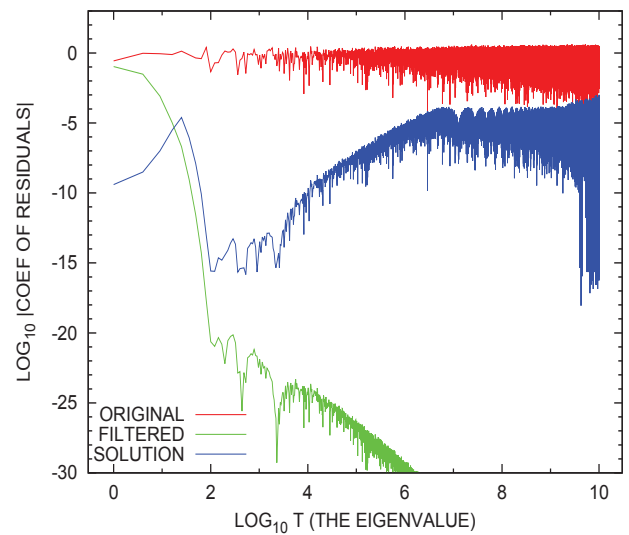


図 17 実験例 4. 各残差の固有ベクトル展開の係数

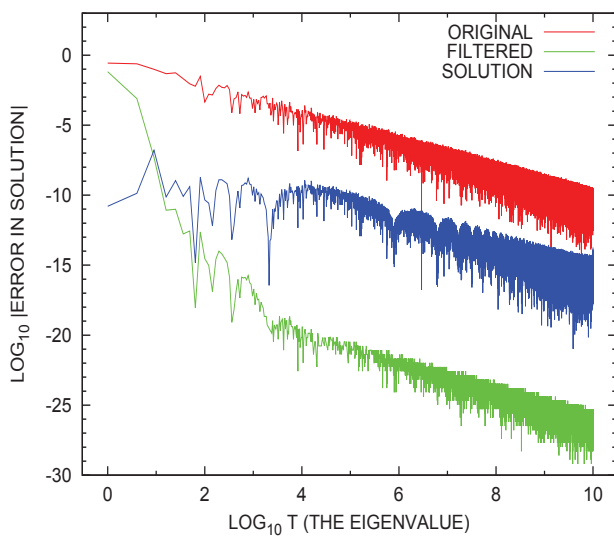


図 15 実験例 3. 各解の誤差の固有ベクトル展開の係数

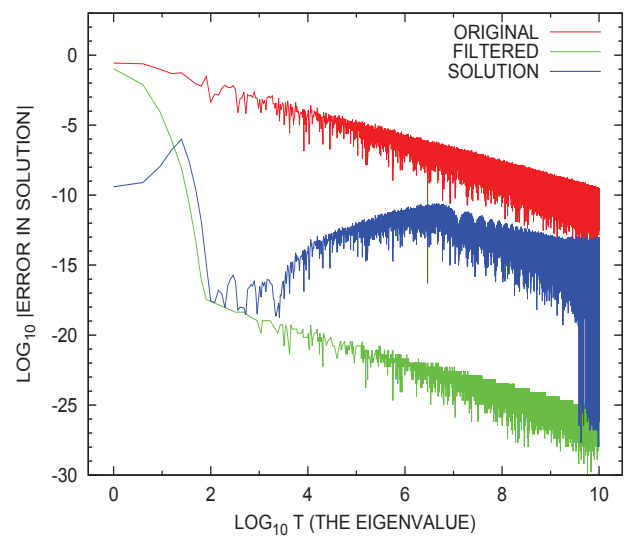


図 18 実験例 4. 各解の誤差の固有ベクトル展開の係数

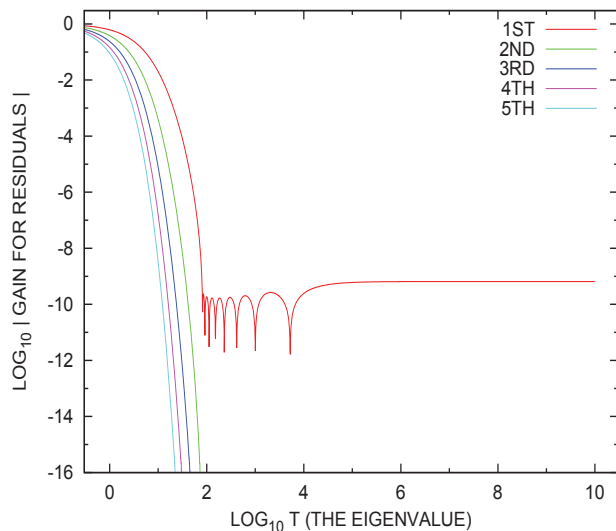


図 19 実験例 5. フィルタの反復と残差の伝達率

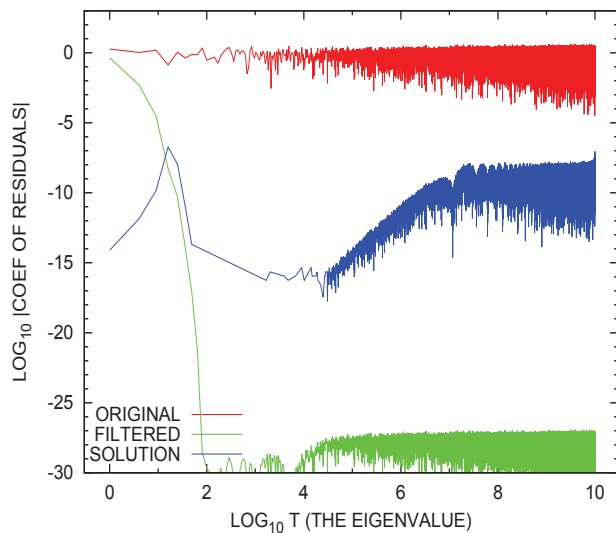


図 20 実験例 5. 各残差の固有ベクトル展開の係数

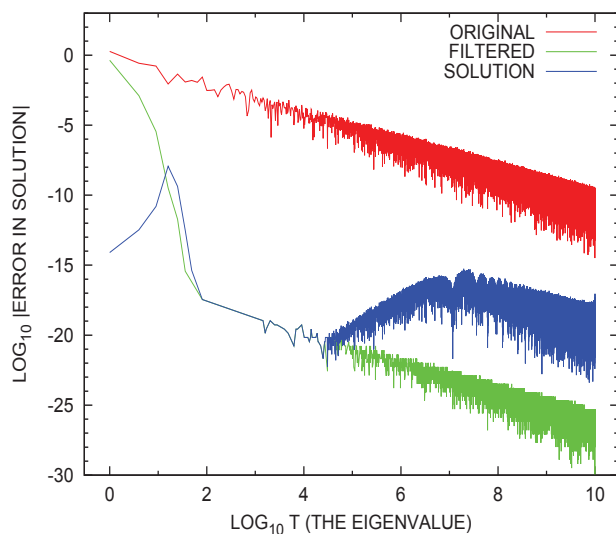


図 21 実験例 5. 各解の誤差の固有ベクトル展開の係数

4. 数値実験

対称正定値行列は、座標の適切な直交変換により正値対角行列に変換できる。今回のフィルタの作用や CG 法は、座標の直交変換に対して共変である。そこで今回の数値実験では、係数行列 A が正値対角行列の場合だけを扱い、その固有値分布をあらかじめ設定して一種のシミュレーションとして実験し、少ない計算の手間で方法の妥当性だけを調べることにした。

レゾルベントを実現する連立 1 次方程式は、シフトを加えることで条件数が低下するので反復法で解き易くなるはずではあるが、それでも反復法には本来ある程度の労力を費やす必要がある。しかし、 A が対角化された座標では極めて容易に解けてしまう。ただし A が一般的な疎行列の場合と比べて丸め誤差の影響が異なる。したがって、今回の A が対角になる座標でのシミュレーションは、「丸め誤差の影響」、「計算時間」、「記憶量」のいずれについても一般的な場合の参考には全くならないことを注意する。また、誤差などのベクトルの大きさを測るのには、座標の直交変換で値が不変な 2-ノルムを用いる。

以下の実験例 1 から実験例 5 までの例は全く同じ連立方程式 $Ax = b$ を求解の対象としている。行列 A は次数が $N=10^5$ の正値対角行列であり、対角要素（固有値）を $\lambda_j = j^2$, $j=1, 2, \dots, N$ と設定した。固有値の最小値は 1, 最大値は 10^{10} であり、行列の条件数は 10^{10} である。「真の解」 x は要素の値を $x_j = u_j / \sqrt{1 + \lambda_j^2}$, $j=1, 2, \dots, N$ とし作成した。ここで u_j は区間 $[0, 1)$ 上の一様乱数である。方程式の右辺ベクトル b は、対角行列 A を真の解 x に乗じて作成した。

実験で行う計算は、レゾルベントの線形結合である近似逆作用素 $\mathcal{F}$ を既に述べた方法により適切に選んだシフト量と結合係数の組で構成する。それからまず最初に初期残差を $r := b$ とし、 $x' := 0$ とおいてから、3つのステップ $\delta x := \mathcal{F} r$, $x' := x' + \delta x$, $r := r - A \delta x$ を ℓ 回反復して x' とその残差 r を作る。次に CG 法を用いて $A \delta x = r$ を初期値 0 から始めて、残差の 2-ノルムが 10^{-8} 以下となるかまたは反復回数が 100 回に達したら反復を止めて、最終的な近似解を $\tilde{x} = x' + \delta x$ とする。

4.1 実験例 1

近似逆作用素 $\mathcal{F}$ は $m = 8$ 個のレゾルベントの線形結合で、各シフトを $\tau_k = -100k$, $k=1, 2, \dots, m$ と設定した。それらの絶対値の最小値は 100 である。レゾルベントの結合係数は「無限遠での展開による係数決定法」(第 3.2 節)により決めた。各線形結合係数は整数で $\gamma_1=8$, $\gamma_2=-28$, $\gamma_3=56$, $\gamma_4=-70$, $\gamma_5=56$, $\gamma_6=-28$, $\gamma_7=8$, $\gamma_8=-1$ となった。

得られた近似逆作用素 $\mathcal{F}$ を残差に作用させる反復の回

数を $\ell = 5$ 回とした。図 7 に初期残差に含まれる各固有ベクトルが反復の結果受ける変化を伝達率として 5 回目までについて両対数でプロットした。横軸は固有ベクトルの固有値であり、縦軸は伝達率の大きさである。(仮に固有値の閾値が $\theta = 100$ であるとすれば、 A の固有値で閾値 θ 以下のものは 9 個である。)

方程式の右辺ベクトル $\mathbf{b}$ の 2-ノルムの値は 3.16×10^2 であり、また真の解 $\mathbf{x}$ の 2-ノルムの値は 3.84×10^{-1} である。フィルタを $\ell = 5$ 回反復した後の残差 $\mathbf{r}$ の 2-ノルムの値は 6.74×10^{-1} であり、近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 2.77×10^{-1} であった。そこからさらに CG 法を 100 回反復して得られた近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ に対する残差の 2-ノルムの値は 8.94×10^1 で、近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 1.03×10^{-3} であった。結果を表 2 に掲げる。

表 2 実験例 1. 残差と誤差の大きさ

	残差の 2-ノルム	誤差の 2-ノルム
計算開始時	3.16E+2	3.84E-1
近似逆による 5 回の反復後	6.74E-1	2.77E-1
CG 法の 100 回反復後	8.94E+1	1.03E-3

図 8 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に残差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は右辺 $\mathbf{b}$ (初期残差) の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 5$ 回適用した後の残差 $\mathbf{r}$ の係数の大きさであり、青は CG 法適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の残差の係数の大きさである。同様に、図 9 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に近似解の真の解からの誤差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は近似解の初期値 $\mathbf{0}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 5$ 回適用した後に得られた近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、青は CG 法を適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさである。

4.2 実験例 2

近似逆作用素 $\mathcal{F}$ は、 $m = 8$ 個のレゾルベントの線形結合で、各シフトを $\tau_k = -10k$, $k=1, 2, \dots, m$ と実験例 1 の場合のそれぞれ 1/10 倍に尺度を変えた値に設定した。それらの絶対値の最小の値は 10 である。レゾルベントの結合係数は「無限遠での展開による係数決定法」(第 3.2 節)により決めた。各線形結合係数は実験例 1 のものと同じになる。 $\gamma_1=8$, $\gamma_2=-28$, $\gamma_3=56$, $\gamma_4=-70$, $\gamma_5=56$, $\gamma_6=-28$, $\gamma_7=8$, $\gamma_8=-1$ となる。この実験例 2 のシフトの分布は、実験例 1 の分布を尺度 1/10 に縮小したもので、レゾルベントの結合係数は実験例 1 と同様に「無限遠での展開による係数決定法」で決定しているので、近似逆作用素の固有値に対する閾値は実験例 1 の場合の 1/10 の値に

なる。(固有値の閾値を仮に $\theta = 10$ とすると、閾値 θ 以下の A の固有値は 3 個である。) 修正量 $\delta \mathbf{x}$ を求める方程式は、閾値が下がると空間 S の階数が一般には減り、また条件数も下がるので、CG 法などの反復法で解くことが容易となるが、その反面として逆作用素を構成する各シフト方程式 $(A - \tau_k I)\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{b}$, $k=1, 2, \dots, m$ を反復法で解く処理は対角シフトの量が減るので実験例 1 の場合と比べて手間が増えるはずである。

方程式の右辺ベクトル $\mathbf{b}$ の 2-ノルムの値は 3.16×10^2 であり、また真の解 $\mathbf{x}$ の 2-ノルムの値は 3.84×10^{-1} である。フィルタを $\ell = 3$ 回反復後の近似解 $\mathbf{x}'$ に対する残差 $\mathbf{r}$ の 2-ノルムは 1.32×10^{-1} であり、近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 1.23×10^{-1} であった。そこから CG 法 100 回反復後の $\tilde{\mathbf{x}}$ の残差の 2-ノルムは 1.42×10^{-2} であり、近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムは 5.01×10^{-8} であった。この結果を表 3 に掲げる。

表 3 実験例 2. 残差と誤差の大きさ

	残差の 2-ノルム	誤差の 2-ノルム
計算開始時	3.16E+2	3.84E-1
近似逆による 3 回の反復後	1.32E-1	1.23E-1
CG 法の 100 回反復後	1.42E-2	5.01E-8

図 11 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に残差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は右辺 $\mathbf{b}$ (初期残差) の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後の残差 $\mathbf{r}$ の係数の大きさであり、青は CG 法適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の残差の係数の大きさである。同様に、図 12 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に近似解の真の解からの誤差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は近似解 (初期値) $\mathbf{0}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後に得られた近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、青は CG 法を適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさである。

4.3 実験例 3

近似逆作用素 $\mathcal{F}$ はレゾルベントを $m = 8$ 個の線形結合で、各シフトを $\tau_k = -10k$, $k=1, 2, \dots, m$ と設定した。これは実験例 2 の場合と同じであり、シフトの絶対値の最小値は 10 である。但しレゾルベントの結合係数 γ_k は既に述べた「最小 2 乗法」(第 3.4 節)により決めた。表 4 に結合係数の値を示す。この例では仮に固有値の閾値が $\theta = 10$ であるとすれば、 A の固有値で閾値 θ 以下のものは 3 個である。

右辺ベクトル $\mathbf{b}$ の 2-ノルムは 3.16×10^2 であり、真の解 $\mathbf{x}$ の 2-ノルムの値は 3.84×10^{-1} である。フィルタを $\ell = 3$ 回反復した後の残差 $\mathbf{r}$ の 2-ノルムは 6.60×10^{-2} で、近似解

表 4 実験例 3. レゾルベントのシフト量と結合係数

k	τ_k	γ_k
1	-10	3.9116985969996335E+1
2	-20	-4.2081341108834266E+2
3	-30	2.0453276263547389E+3
4	-40	-5.3686107589206276E+3
5	-50	8.1515453699816408E+3
6	-60	-7.1787690402409244E+3
7	-70	3.4097769351445663E+3
8	-80	-6.7657370720104586E+2

$\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 6.59×10^{-2} であった。そこから CG 法で 100 回反復後に得られた近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ に対する残差の 2-ノルムは 2.40×10^{-3} となり、近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムは 1.60×10^{-7} であった。この結果を表 5 に掲げる。

表 5 実験例 3. 残差と誤差の大きさ

	残差の 2-ノルム	誤差の 2-ノルム
計算開始時	3.16E+2	3.84E-1
近似逆による 3 回の反復後	6.60E-2	6.59E-2
CG 法の 100 回反復後	2.40E-3	1.60E-7

図 14 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に残差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は右辺 $\mathbf{b}$ (初期残差) の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後の残差 $\mathbf{r}$ の係数の大きさであり、青は CG 法適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ に対する残差の係数の大きさである。同様に、図 15 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に近似解の真の解からの誤差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は近似解 (初期値) $\mathbf{0}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後に得られた近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、青は CG 法を適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解からの誤差の係数の大きさである。

4.4 実験例 4

近似逆作用素 $\mathcal{F}$ は、レゾルベントを $m = 8$ 個の線形結合で、各シフトを $\tau_k = -80/k$, $k=1, 2, \dots, m$ と設定した。シフトの絶対値の最小値は 10 である。この例で仮に固有値の閾値を $\theta = 80$ であるとすれば、閾値 θ 以下の A の固有値は 8 個である。レゾルベントの結合係数は前述の「最小 2 乗法」(第 3.4 節)を用いて決めた。それによる結合係数 γ_k の値を表 6 に示す。

与えた右辺ベクトル $\mathbf{b}$ の 2-ノルムの値は 3.16×10^2 であり、また真の解 $\mathbf{x}$ の 2-ノルムの値は 3.84×10^{-1} である。フィルタを $\ell = 3$ 回反復した後の残差 $\mathbf{r}$ の 2-ノルムの値は 1.12×10^{-1} であり、この段階での近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 1.08×10^{-1} であった。そこか

表 6 実験例 4. レゾルベントのシフト量と結合係数

k	τ_k	γ_k
1	-8.0000000000000000E+1	-3.4633496247554206E-2
2	-4.0000000000000000E+1	2.4325296682180348E+0
3	-2.6666666666666664E+1	-2.5354810419128839E+1
4	-2.0000000000000000E+1	8.1299585987653515E+1
5	-1.6000000000000000E+1	-9.6118154022834702E+1
6	-1.3333333333333332E+1	4.7593523079871680E+1
7	-1.1428571428571427E+1	-3.7032470900040167E+1
8	-1.0000000000000000E+1	2.8214430102508015E+1

ら CG 法の反復を 100 回行った後の近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の残差の 2-ノルムの値は 1.12×10^{-2} となり、そのときの近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 1.00×10^{-6} であった。この結果を表 7 に掲げる。

表 7 実験例 4. 残差と誤差の大きさ

	残差の 2-ノルム	誤差の 2-ノルム
計算開始時	3.16E+2	3.84E-1
近似逆による 3 回の反復後	1.12E-1	1.08E-1
CG 法の 100 回反復後	1.12E-2	1.00E-6

図 17 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に残差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は右辺 $\mathbf{b}$ (初期残差) の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後の残差 $\mathbf{r}$ の係数の大きさであり、青は CG 法適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の残差の係数の大きさである。同様に、図 18 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に近似解の真の解からの誤差の固有ベクトル展開の係数の大きさとしてプロットしたものである。赤は近似解 (初期値) $\mathbf{0}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後に得られた近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、青は CG 法を適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさである。

4.5 実験例 5

近似逆作用素 $\mathcal{F}$ は、レゾルベントを $m = 8$ 個の線形結合で、各シフトを $\tau_k = -80/k$, $k=1, 2, \dots, m$ と設定した。シフトの絶対値の最小値は 10 である。この例で仮に固有値の閾値を $\theta = 80$ であるとすれば、閾値 θ 以下の A の固有値は 8 個である。レゾルベントの結合係数は前述の「最小 2 乗法」(第 3.4 節)を用いて決めた。ここまでは先の実験例 4 と同じであるが、但し係数の決定には四倍精度演算を用いて得られた結合係数を倍精度に丸めた数値を用いている。結合係数 γ_k の値は以前に示した表 1 と同一である。(シフトの値 τ_k の方は尺度が 1 桁異なる。)

与えた右辺ベクトル $\mathbf{b}$ の 2-ノルムの値は 3.16×10^2 であり、また真の解 $\mathbf{x}$ の 2-ノルムの値は 1.88×10^0 である。フィルタを $\ell = 3$ 回反復した後の残差 $\mathbf{r}$ の 2-ノルムの値は

4.36×10^{-1} であり、この段階での近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 4.36×10^{-1} であった。そこから CG 法の反復を 100 回行なって得られた近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の残差の 2-ノルムの値は 1.11×10^{-6} となり、そのときの近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の 2-ノルムの値は 1.16×10^{-8} であった。この結果を表 8 に掲げる。

表 8 実験例 5. 残差と誤差の大きさ

	残差の 2-ノルム	誤差の 2-ノルム
計算開始時	3.16E+2	1.88E-0
近似逆による 3 回の反復後	4.36E-1	4.36E-1
CG 法の 100 回反復後	1.11E-6	1.16E-8

図 20 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に残差の固有ベクトル展開の係数の大きさにとってプロットしたものである。赤は右辺 $\mathbf{b}$ (初期残差) の係数の大きさで、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後の残差 $\mathbf{r}$ の係数の大きさであり、青は CG 法適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の残差の係数の大きさである。同様に、図 21 の両対数グラフは、横軸に固有値を、縦軸に近似解の真の解からの誤差の固有ベクトル展開の係数の大きさにとってプロットしたものである。赤は近似解 (初期値) $\mathbf{0}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさで、緑はフィルタを $\ell = 3$ 回適用した後に得られた近似解 $\mathbf{x}'$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさであり、青は CG 法を適用後に得られた最終近似解 $\tilde{\mathbf{x}}$ の真の解 $\mathbf{x}$ からの誤差の係数の大きさである。

5. 考察と将来に向けて

近似逆作用素を構成するレゾルベントのシフトの最適な配置についての説明はできていない。高次のフィルタを用いるとフィルタが丸め誤差を拡大する傾向が強まるようである。シフトとして虚数を採用することを許すならば、高次でも性質の良いフィルタを作れる可能性がある。

近似逆作用素を右辺ベクトル $\mathbf{b}$ に適用して得られる近似解 $\mathbf{x}'$ に対する残差 $\mathbf{r}$ は、「大きい固有値のベクトル」が除去されて「小さい固有値のベクトル」だけが残る、その実効的な階数は行列の固有値分布に依存する。近似逆作用素の固有値に対する閾値は「小さい固有値」の個数があまり多くならないように適切に選ぶ必要があるが、閾値を下げるためにはレゾルベントのシフト量の大きさも小さくする必要があり、シフト方程式を反復法で解くのが容易ではなくなるというトレードオフがある。

「大きい固有値のベクトル」が十分に除去された残差をつくり、それを右辺とする解の修正のための方程式を CG 法で解くが、CG の算法中で「大きい固有値を持つ行列 A 」をベクトルに乗じるとき、丸め誤差や既に十分に除去低減した「大きい固有値のベクトル」が拡大されて、CG の算法内での残差の中で「大きい固有値のベクトル」が再成長して収束を遅くする傾向がある。これが、(現段階に於い

て) この方法の有効性が最初期待した程でない理由と思われる。「大きい固有値のベクトル」を除去する処理と CG 法の計算を交互に繰り返す手法がより有効であるかもしれない。

今後は、このアプローチをより实际的、現実的な問題に適用してみて有効性の程度を検証してみる必要がある。特に係数行列が一般的な疎行列の場合に丸め誤差の影響を受けて性質がどのように変わるかを調べる必要がある。

参考文献

- [1] Åke Björck and Vistor Pereyra: "Solution of Vandermonde systems of equations", *Math. Comp.*, Vol.24, No.112(1970), pp.893–903.
- [2] Gene H. Golub and Charles F. van Loan: *Matrix Computations*, 3rd Ed., *The John Hopkins Univ. Press* (1996).
- [3] 村上弘: 「対称正定値行列の連立 1 次方程式に対するフィルタ適用の可能性の検討」, 情報処理学会研究報告, Vol.2013-HPC-142, No.1 (2013 年 12 月), pp.1–6.