ISSN 1346-5597

National Institute of Informatics

NII Technical Report

On the Convergence of the Conjugate Residual Method for Singular Systems

Ken HAYAMI

NII-2001-003J
Aug 2001

URL: http://www.nii.ac.jp/ Tokyo 101-8430, JAPAN +81-3-4212-2000 FAX: +81-3-3556-1916

特異な系に対する共役残差法の収束性について

速水 謙
国立情報学研究所 情報学基礎研究系

On the Convergence of the Conjugate Residual Method for Singular Systems

Ken HAYAMI
Foundations of Informatics Research Division
National Institute of Informatics

Abstract. Consider applying the Conjugate Residual (CR) method to systems of linear equations $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ or least squares problems $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$, where $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ is singular and nonsymmetric.

First, we prove the following. When $R(A)^\perp = \ker A$, the CR method can be decomposed into the $R(A)$ and $\ker A$ components, and the necessary and sufficient condition for the method to converge to the least squares solution without breaking down for arbitrary $\boldsymbol{b}$ and initial approximate solution $\boldsymbol{x}_0$ is that the symmetric part $M(A)$ of A is semi-definite and $\mathrm{rank}\, M(A) = \mathrm{rank} A$. Furthermore, when $\boldsymbol{x}_0 \in R(A)$, the approximate solution converges to the pseudo inverse solution.

Next, for the case when $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$ and $\boldsymbol{b} \in R(A)$, the necessary and sufficient condition for the CR method to converge to the least squares solution without breaking down for arbitrary $\boldsymbol{x}_0$, is also derived.

Finally, we will give examples corresponding to the above two cases arising in the finite difference discretization of two-point boundary value problems of an ordinary differential equation.

1 はじめに

偏微分方程式の離散近似などで生じる連立一次方程式

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

を考える．ここで係数行列 A は $n \times n$ の実行列，$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^n$ とする．(1.1) の反復解法で，特に係数行列 A が非対称な場合のクリロフ部分空間解法には，双直交性に基づいた Bi-CG 法 (Bi-Conjugate Gradient method)[8] や，その改良版である CGS 法 (Conjugate Gradients-Squared method)[21]，Bi-CGSTAB 法 [25]，QMR 法 (Quasi-Minimal

Residual method)[11], TFQMR 法 (Transpose-Free Quasi-Minimal Residual method)[9] などがある．また, (1.1) の残差 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$ の最小化に基づいたアルゴリズムとして, 共役残差法 (Conjugate Residual method: CR 法)[7], GCR 法 (Generalized Conjugate Residual method)[7], Orthomin(k) 法 [26], GMRES 法 (Generalized Minimum Residual method)[20] などがあり, 係数行列 A が正則な場合はそれらの解法の振る舞いはよく知られている [7, 18, 20].

一方, 例えば流体解析などで生じる偏微分方程式の離散近似では, 全周ノイマン条件など, 境界条件によっては, 得られる連立一次方程式の係数行列は特異になる [27, 14]. また, 辺要素を用いた有限要素法による電磁界解析においても特異な系が生じることが知られている [2, 19, 15]. さらに, 有限要素法で冗長な内挿関数を用いる場合などにも特異な系を扱う [22]. また, 待ち行列網の解析などで生じる確率行列の定常確率ベクトルの計算に於いても特異な系を扱う必要がある [24, 10, 4]. このような特異な系に対しては, 連立一次方程式 (1.1) に解が存在しない可能性があるので, 問題を最小二乗問題 $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$ としてとらえた方がより一般的である.

このような特異な系に対する反復解法の特性については, 線型定常反復法に関しては例えば [23, 5] の研究があり, 半反復法 (semi-iterative method) に関しては [6] がある．一方, クリロフ部分空間法の振る舞いについては, 共役勾配法に関する [17, 24, 16] の研究, 双直交性に基づいた手法に関しては, Bi-CG 法, CGS 法, Bi-CGSTAB 法に関する [27, 14] や, QMR 法や TFQMR 法に関する [10, 28] などの研究がある．また, 残差の最小化に基づいた手法に関する研究には, GMRES 法に関する [3], Orthomin(k) 法に関する [29], そして共役残差法 (CR 法) に関する [14, 1] の研究がある．系が特異な場合, 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 [27, 14] にあるように, 系に修正を施す必要がある．一方, 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 [1] にならって CR 法に着目し, そこでの特異な系に対する CR 法の収束性の議論を修正し, $R(A)^\perp = \ker A$ の場合は, 共役残差法 (CR 法) を $R(A)$ と $\ker A$ の成分に分離できることを示し, CR 法が任意の初期近似解に対して破綻なく収束するための必要十分条件を導く．さらに, $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$ でかつ $\boldsymbol{b} \in R(A)$ の場合も, CR 法が任意の初期近似解に対して破綻なく収束するための必要十分条件を導く [12, 13]. 最後に, 特異な系の例として [1] の常微分方程式の 2 点境界値問題の例をとりあげ, 上記の条件の成否を検証する.

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,
とする.

2 正則な系に対する CR 法とその収束性

はじめに, 文献 [7, 18, 1] に沿って, 正則な系に対する CR 法のアルゴリズムとその収束性について述べる.

(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, CR 法のアルゴリズム [7] は次のように与えられる.

CR 法のアルゴリズム

初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ を選ぶ.
$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0$
$\boldsymbol{p}_0=\boldsymbol{r}_0$
$i=0,1,\ldots$ に対して残差 $(\boldsymbol{r})$ が収束するまで以下を繰り返す.

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

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

$$\beta_i=-\frac{(A\boldsymbol{r}_{i+1},A\boldsymbol{p}_i)}{(A\boldsymbol{p}_i,A\boldsymbol{p}_i)}$$

$$\boldsymbol{p}_{i+1}=\boldsymbol{r}_{i+1}+\beta_i\,\boldsymbol{p}_i$$

(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. □

[**証明**] $(\boldsymbol{x}, M\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}, A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ である．ここで A が正則でないとすると, ${}^{\exists}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}; A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$. 従って, そのような $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ に対して $(\boldsymbol{x}, M\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = 0$ となり, M の定値性に矛盾する．従って, A は正則である． ∎

さて, 係数行列 A が正則なとき, CR 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 [7, 18].

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

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

   が成り立つ.
2. 全ての $i \geq 0$ 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 $\Longrightarrow$ ${}^{\exists}\boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}$; $(\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}) = 0$. □

[**証明**] $(\boldsymbol{x}, M(A)\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ より, $M(A)$ が 0 の固有値をもつ場合は, 対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ とおくと, ${}^{\exists}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$; $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, M(A)\boldsymbol{x}) = 0$.

$M := M(A)$: 不定値とすると, M は対称行列だからその固有値は全て実数で,

$$^{\exists}\lambda_1 > 0,\ ^{\exists}\boldsymbol{v}_1\,;\ \|\boldsymbol{v}_1\| = 1\,;\ M\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1\boldsymbol{v}_1,$$

$$^{\exists}\lambda_2 < 0,\ ^{\exists}\boldsymbol{v}_2\,;\ \|\boldsymbol{v}_2\| = 1\,;\ M\boldsymbol{v}_2 = \lambda_2\boldsymbol{v}_2\,.$$

ここで, $\lambda_1 \neq \lambda_2$ より $(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2) = 0$. 従って, $c \neq 0$ を任意の定数として,
$\boldsymbol{x} := c\left(\sqrt{-\lambda_2}\boldsymbol{v}_1 + \sqrt{\lambda_1}\boldsymbol{v}_2\right)$ とおくと, $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ で, $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, M\boldsymbol{x}) = 0$. ∎

この補題を用いると, CR 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「CR 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, C1–C3 は同値である.

(C1) 任意の初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, CR 法は破綻せず, かつ収束する.
(C2) 任意の初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, CR 法は破綻しない.
(C3) 係数行列 A の対称部 $M(A)$ が定値である． □

［**証明**］ (C1) $\Longrightarrow$ (C2) は自明.

(C2) $\Longrightarrow$ (C3) を対偶によって示す. $M(A)$ が定値でないとすると, 補題 2.3 より $^{\exists}\boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}; (\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}) = 0$. そこで, CR 法のアルゴリズム (2.2) において初期近似解を $\boldsymbol{x}_0 = A^{-1}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{v})$ ととると $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}$ となる. 従って, $\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}$ より $(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{p}_0) = (\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}) = 0$ となる. 一方, $\boldsymbol{p}_0 \neq \boldsymbol{0}$ より $(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0) \neq 0$ なので $\alpha_0 = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{p}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)} = 0$ を得る. 従って $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_0 \neq \boldsymbol{0}$, $\beta_0 = -\dfrac{(A\boldsymbol{r}_1, A\boldsymbol{p}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)} = -1$. よって, $\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{0}$ となり, $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{r}_1 \neq \boldsymbol{0}$ なのに $\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{0}$ となり, $i = 1$ において α_1 の分母は 0 となり, CR 法のアルゴリズムは破綻する.

(C3) $\Longrightarrow$ (C1) が定理 2.2 であった. ∎

3 特異な系に対する CR 法の収束性

次に, 文献 [1] に沿って, 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

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

に対する CR 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] では,

$\boldsymbol{q}_1, \cdots, \boldsymbol{q}_r : R(A)$ 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)

として, 係数行列 A を

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

により直交変換し, CR 法のアルゴリズムを $R(A)$ と $R(A)^{\perp}$ の成分に分離することにより, 特異な系に対する CR 法の収束性を論じている. ただし, $A_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}}AQ_1$, $A_{12} := {Q_1}^{\mathrm{T}}AQ_2$ である. その際, 文献 [1] では $r \times r$ 行列 A_{11} は正則であるとしている. また, 分離を可能にするために

$$\textbf{条件 A}: \ A_{12} = {Q_1}^{\mathrm{T}}AQ_2 = 0$$

という条件を仮定している.

しかし, これには二つの問題点がある. まず, 行列 A_{11} は正則であるとは限らない. 更に, 上記の条件 A の意味が明らかでない. そこで, 本論文ではまずこれらの二点を修正する. そして, 文献 [1] に沿って特異な系に対する CR 法の収束性を論じ直す.

3.1 A_{11} が正則であるための必要十分条件

まず, A_{11} が正則でない例をあげる. 例えば,

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

とし, $\boldsymbol{e}_1 := (1,0,0)^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{e}_2 := (0,1,0)^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{e}_3 := (0,0,1)^{\mathrm{T}}$ とおくと,
$A\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{0},\ A\boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{e}_1,\ A\boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{e}_3$ となる.

従って, $R(A) = \langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_3 \rangle$ で $r = 2$ となり, $R(A)^{\perp} = \langle \boldsymbol{e}_2 \rangle$ である. 因みに,
$(\ker A)^{\perp} = \langle \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3 \rangle,\ \ker A = \langle \boldsymbol{e}_1 \rangle$ となり, $R(A) \neq (\ker A)^{\perp},\ R(A)^{\perp} \neq \ker A$ である.

そこで, $\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{e}_3$, $\boldsymbol{q}_3 = \boldsymbol{e}_2$ とおき, $Q_1 = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2] = [\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_3],\ Q_2 = [\boldsymbol{q}_3] = [\boldsymbol{e}_2]$ とおくと,

$$A_{11} = {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1 = \begin{bmatrix} {\boldsymbol{e}_1}^{\mathrm{T}} \\ {\boldsymbol{e}_3}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

となり, A_{11} は正則でない.

また, このとき

$$A_{12} = {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_2 = \begin{bmatrix} {\boldsymbol{e}_1}^{\mathrm{T}} \\ {\boldsymbol{e}_3}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} [\boldsymbol{e}_2] = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

実は, 以下の定理が成り立つ.

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

[**証明**]
${Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1$: 正則
$\iff {Q_1}^{\mathrm{T}} [\, A\boldsymbol{q}_1, \cdots, A\boldsymbol{q}_r] = \left[{Q_1}^{T} A\boldsymbol{q}_1, \cdots, {Q_1}^{\mathrm{T}} A\boldsymbol{q}_r \right]$: 正則
$\iff \left[\sum_{i=1}^{r} c_i \left({Q_1}^{\mathrm{T}} A\boldsymbol{q}_i \right) = \boldsymbol{0} \implies c_1 = \cdots = c_r = 0 \right]$

$$\iff \left[{Q_1}^{\mathrm{T}} A \left(\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i \right) = \boldsymbol{0} \implies c_1 = \cdots = c_r = 0 \right]$$
$$\iff \left[A \left(\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i \right) \in R(A) \cap R(A)^{\perp} \implies c_1 = \cdots = c_r = 0 \right]$$
$$\iff \left[A \left(\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i \right) = \boldsymbol{0} \implies c_1 = \cdots = c_r = 0 \right]$$
$$\iff \left[\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i \in \ker A \implies c_1 = \cdots = c_r = 0 \right]$$
$$\iff [\, \boldsymbol{x} \in R(A) \cap \ker A \implies \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}]$$
$$\iff R(A) \cap \ker A = \{\boldsymbol{0}\}$$
$$\iff R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n \,. \quad \blacksquare$$

さらに, 次の定理が成り立つ.

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

[**証明**]
$${Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_2 = 0$$
$$\iff {Q_1}^{\mathrm{T}} [\, A\boldsymbol{q}_{r+1}, \cdots, A\boldsymbol{q}_n] = 0$$
$$\iff A\boldsymbol{q}_j \in R(A)^{\perp} \quad (r+1 \le j \le n)$$
$$\iff A\boldsymbol{q}_j \in R(A) \cap R(A)^{\perp} = \{\boldsymbol{0}\} \quad (r+1 \le j \le n)$$
$$\iff \langle \boldsymbol{q}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{q}_n \rangle = \ker A$$
$$\iff R(A)^{\perp} = \ker A \,. \quad \blacksquare$$

定理 3.2 より $R(A)^{\perp} = \ker A$ は $A_{12} = 0$ と同値であり, 次節で示すように, 変換 $Q^{\mathrm{T}} A Q$ により CR 法が分離できるための必要十分条件となっている.

また, 定理 3.1 より次の系を得る.

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

[**証明**] $R(A)^{\perp} = \ker A \Longrightarrow R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n \iff A_{11}$: 正則 . ∎

ところで, 一般に次の補題が成り立つ.

補題 3.4 $R(A)^{\perp} = \ker A^{\mathrm{T}} \,.$ □

[**証明**]
$$\boldsymbol{x} \in R(A)^{\perp}$$
$$\iff (A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}) = 0 \quad \forall \boldsymbol{y} \in \mathbf{R}^n$$
$$\iff A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

$\Longleftrightarrow \boldsymbol{x} \in \ker A^{\mathrm{T}}$. ∎

従って, 次の補題を得る.

補題 3.5 以下の (1), (2), (3), (4) は同値である.

(1) $R(A)^{\perp} = \ker A$,
(2) $A_{12} = 0$,
(3) $\ker A^{\mathrm{T}} = \ker A$,
(4) $R(A^{\mathrm{T}}) = R(A)$. □

[**証明**] (1) $\Longleftrightarrow$(2) は定理 3.2. (1) $\Longleftrightarrow$ (3) は補題 3.4 より明らか. (1) $\Longleftrightarrow$ (4) は, 補題 3.4 を A^{T} に適用すると $R(A^{\mathrm{T}})^{\perp} = \ker A$ だから,
$R(A)^{\perp} = \ker A \Longleftrightarrow R(A^{\mathrm{T}})^{\perp} = R(A)^{\perp} \Longleftrightarrow R(A^{\mathrm{T}}) = R(A)$ より示される. ∎

以下に条件 $R(A)^{\perp} = \ker A$ をみたす簡単な例 [3] をいくつか挙げる. まず, 定理 3.2 より次の系を得る.

系 3.6 $A^{\mathrm{T}} = A \implies R(A)^{\perp} = \ker A$. □

[**証明**]
$A^{\mathrm{T}} = A$
$\implies$
$$\begin{bmatrix} {A_{11}}^{\mathrm{T}} & 0 \\ {A_{12}}^{\mathrm{T}} & 0 \end{bmatrix} = \left(Q^{\mathrm{T}} A Q\right)^{\mathrm{T}} = Q^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} Q = Q^{\mathrm{T}} A Q = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$
$\implies A_{12} = 0$
$\Longleftrightarrow R(A)^{\perp} = \ker A$. ∎

従って, 対称行列 A は条件 $R(A)^{\perp} = \ker A$ をみたしている. より一般的には, 正規行列も上記の条件をみたしている.

補題 3.7 A : 正規 $\implies R(A)^{\perp} = \ker A$. □

[**証明**] A が正規行列とすると,
$\boldsymbol{x} \in \ker A \Longleftrightarrow A\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \Longleftrightarrow (A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = 0 \Longleftrightarrow (A^{\mathrm{T}} A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = 0$
$\Longleftrightarrow (AA^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = 0 \Longleftrightarrow (A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}, A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = 0 \Longleftrightarrow A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \Longleftrightarrow \boldsymbol{x} \in \ker A^{\mathrm{T}}$.
従って, $\ker A = \ker A^{\mathrm{T}}$ となるから $R(A)^{\perp} = \ker A$ を得る. ∎

最後に, 正則行列も上記の条件をみたすことは次の補題からわかる.

補題 3.8 A : 正則 $\implies R(A)^{\perp} = \ker A$. □

[**証明**] A : 正則 $\implies R(A)^{\perp} = \ker A = \{\mathbf{0}\}$. ∎

3.2 CR 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 CR 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, CR 法の残差の収束性が分離された CR 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 CR 法の収束定理を導く.

式 (3.2) のようにおくと, (2.2) の CR 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.

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

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

(3.4)

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

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

(3.5)

ここで, 残差ベクトル $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$ に注目すると,
$\tilde{\boldsymbol{r}} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} - Q^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x}$ だが,

$$Q^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x} = Q^{\mathrm{T}} A Q \tilde{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^1 \\ \boldsymbol{x}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} \boldsymbol{x}^1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

より,

$$\tilde{\boldsymbol{r}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^1 \\ \boldsymbol{r}^2 \end{bmatrix} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} - Q^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^1 - A_{11} \boldsymbol{x}^1 \\ \boldsymbol{b}^2 \end{bmatrix} \tag{3.6}$$

となる. 従って, (3.1) の最小 2 乗問題において

$$
\begin{aligned}
\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2{}^2 &= \|\boldsymbol{r}\|_2{}^2 = \boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}QQ^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} = (Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r})^{\mathrm{T}}Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} \\
&= \tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{r}} = \|\boldsymbol{r}^1\|_2{}^2 + \|\boldsymbol{r}^2\|_2{}^2 = \|\boldsymbol{r}^1\|_2{}^2 + \|\boldsymbol{b}^2\|_2{}^2 \\
&\geq \|\boldsymbol{b}^2\|_2{}^2 \qquad (3.7)
\end{aligned}
$$

である. ここで, A_{11} は正則なので, 式 (3.6) より $\boldsymbol{x}^1 = A_{11}{}^{-1}\boldsymbol{b}^1$ のとき $\boldsymbol{r}^1 = \boldsymbol{0}$ となるから,

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

である. よって,

$$
\|\boldsymbol{r}^1\|_2{}^2 = \|\boldsymbol{r}\|_2{}^2 - \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2{}^2 \qquad (3.8)
$$

を得る.

さて, 式 (3.3),(3.4),(3.5) に注意すれば (2.2) の CR 法のアルゴリズムの $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}$ の更新式は次のように $R(A)$ と $\ker A$ の成分に分離される.

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{x}_{i+1}^1 = \boldsymbol{x}_i^1 + \alpha_i\boldsymbol{p}_i^1 && \boldsymbol{x}_{i+1}^2 = \boldsymbol{x}_i^2 + \alpha_i\boldsymbol{p}_i^2 \\
&\boldsymbol{r}_{i+1}^1 = \boldsymbol{r}_i^1 - \alpha_i A_{11}\boldsymbol{p}_i^1 && \boldsymbol{r}_{i+1}^2 = \boldsymbol{r}_i^2 = \boldsymbol{b}^2 \\
&\boldsymbol{p}_{i+1}^1 = \boldsymbol{r}_{i+1}^1 + \beta_i\boldsymbol{p}_i^1 && \boldsymbol{p}_{i+1}^2 = \boldsymbol{r}_{i+1}^2 + \beta_i\boldsymbol{p}_i^2 = \boldsymbol{b}^2 + \beta_i\boldsymbol{p}_i^2
\end{aligned}
$$

また,

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}, A\boldsymbol{p}) &= (Q\tilde{\boldsymbol{r}}, AQ\tilde{\boldsymbol{p}}) = \tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{T}}Q^{\mathrm{T}}AQ\tilde{\boldsymbol{p}} \\
&= \left[\boldsymbol{r}^{1\mathrm{T}}, \boldsymbol{r}^{2\mathrm{T}}\right] \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}^1 \\ \boldsymbol{p}^2 \end{bmatrix} = (\boldsymbol{r}^1, A_{11}\boldsymbol{p}^1),
\end{aligned}
$$

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

ただし,

$$
\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}^1 \\ \boldsymbol{p}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}\boldsymbol{p}^1 \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix},
$$

従って,

$$
(A\boldsymbol{p}, A\boldsymbol{p}) = (A_{11}\boldsymbol{p}^1, A_{11}\boldsymbol{p}^1).
$$

さらに,

$$
\begin{aligned}
(A\boldsymbol{r}, A\boldsymbol{p}) &= (AQ\tilde{\boldsymbol{r}}, AQ\tilde{\boldsymbol{p}}) = \tilde{\boldsymbol{r}}^{\mathrm{T}}Q^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}QQ^{\mathrm{T}}AQ\tilde{\boldsymbol{p}} \\
&= (\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{r}}, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{p}}) = (A_{11}\boldsymbol{r}^1, A_{11}\boldsymbol{p}^1).
\end{aligned}
$$

これらより,

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

および

$$
\beta_i = -\frac{(A\boldsymbol{r}_{i+1}, A\boldsymbol{p}_i)}{(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i)} = -\frac{(A_{11}\boldsymbol{r}_{i+1}^1, A_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}{(A_{11}\boldsymbol{p}_i^1, A_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}
$$

を得る．

以上をまとめると，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 CR 法のアルゴリズムは次のようになる．

分離された CR 法のアルゴリズム

初期近似解$\boldsymbol{x}_0$を選ぶ．

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

$i = 0, 1, \ldots$ に対して残差の $R(A)$ 成分 ($\boldsymbol{r}^1$) が収束するまで以下を繰り返す．

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

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

$$\beta_i = -\frac{(A_{11}\boldsymbol{r}_{i+1}^1,\, A_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}{(A_{11}\boldsymbol{p}_i^1,\, A_{11}\boldsymbol{p}_i^1)}$$

$\boldsymbol{p}_{i+1}^1 = \boldsymbol{r}_{i+1}^1 + \beta_i\boldsymbol{p}_i^1$	$\boldsymbol{p}_{i+1}^2 = \boldsymbol{b}^2 + \beta_i\boldsymbol{p}_i^2$

(3.9)

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

$$A_{11}\boldsymbol{x}^1 = \boldsymbol{b}^1 \tag{3.10}$$

に適用した CR 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．(式 (3.7) 参照.) 従って，分離された CR 法のアルゴリズム (3.9) の残差の収束性は，式 (3.10) に対する CR 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 CR 法の収束性に関して次の補題を得る．

補題 3.9 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 $l \geq 0$ 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

$$\frac{{\|\boldsymbol{r}_{i+1}^1\|_2}^2}{{\|\boldsymbol{r}_i^1\|_2}^2} \leq 1 - \frac{\{\lambda_{\min}(M(A_{11}))\}^2}{\lambda_{\max}(A_{11}^{\mathrm{T}}A_{11})} \tag{3.11}$$

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 (3.11) が成り立つ. □

3.3 $R(A)^{\perp} = \ker A$ の場合の収束定理

次に, [1] と同様にして, 補題 3.9 を特異な系に対する CR 法の収束定理へ拡張する. そのためにまず以下の補題を示す.

補題 3.10 $R(A)^{\perp} = \ker A$ なら, $\boldsymbol{v}^1 := {Q_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \Longleftrightarrow A\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$. □

[**証明**]

$$\boldsymbol{v}^1 = {Q_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} {\boldsymbol{q}_1}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ {\boldsymbol{q}_r}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \Longleftrightarrow \boldsymbol{v} \in R(A)^{\perp} = \ker A \Longleftrightarrow A\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}. \quad ∎$$

補題 3.11 $R(A)^{\perp} = \ker A$ かつ $M(A_{11})$ が正則なら, $\lambda_{\min}(M(A_{11})) = \lambda_{\min}^{+}(M(A))$. □

[**証明**] $R(A)^{\perp} = \ker A$ なら, 式 (3.3) が成り立つので,

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

従って

$$Q^{\mathrm{T}}M(A)Q = \begin{bmatrix} M(A_{11}) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.12}$$

を得る. よって

$$Q^{\mathrm{T}}\{M(A) - \lambda\mathrm{I}\}Q = Q^{\mathrm{T}}M(A)Q - \lambda\mathrm{I}$$

より

$$\det Q^{\mathrm{T}} \det\{M(A) - \lambda\,\mathrm{I}\} \det Q = \det\{Q^{\mathrm{T}}M(A)Q - \lambda\,\mathrm{I}\} = \det \begin{bmatrix} M(A_{11}) - \lambda\,\mathrm{I}_r & 0 \\ 0 & -\lambda\,\mathrm{I}_{n-r} \end{bmatrix} \tag{3.13}$$

を得る. 従って,

$$M(A) \text{ の固有値の集合} = M(A_{11}) \text{ の固有値の集合} \cup \{0\}$$

である．さらに, 仮定より $M(A_{11})$ は正則だから $M(A_{11})$ は 0 の固有値をもたない．よって

$$\lambda_{\min}(M(A_{11})) = \lambda_{\min}^{+}(M(A))$$

を得る． ∎

同様にして次の補題が成り立つ.

補題 3.12 $R(A)^{\perp} = \ker A$ のとき,
$M(A_{11})$: 定値 $\Longleftrightarrow$「$M(A)$: 半定値, $\operatorname{rank} M(A) = \operatorname{rank} A$」. □

[**証明**] 補題 3.11 と同様に, $R(A)^{\perp} = \ker A$ より (3.12) および (3.13) が成り立つから,
$M(A_{11})$: 定値 $\Longleftrightarrow$ $M(A)$: 半定値, $\operatorname{rank} M(A) = \operatorname{rank} A = r$ は明らか. ∎

補題 3.13 $R(A)^{\perp} = \ker A$ なら, $\lambda_{\max}({A_{11}}^{\mathrm{T}} A_{11}) = \lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}} A)$. □

[**証明**] $R(A)^{\perp} = \ker A$ なら式 (3.3) が成り立つので,

$$Q^{\mathrm{T}} A A^{\mathrm{T}} Q = (Q^{\mathrm{T}} A Q)(Q^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} Q) = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} {A_{11}}^{\mathrm{T}} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (A_{11} {A_{11}}^{\mathrm{T}}) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

を得る．従って,

$$AA^{\mathrm{T}} \text{の固有値の集合} = A_{11} {A_{11}}^{\mathrm{T}} \text{の固有値の集合} \cup \{0\}$$

となり,

$$\lambda_{\max}({A_{11}}^{\mathrm{T}} A_{11}) = \lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}} A)$$

を得る． ∎

式 (3.8) 及び補題 3.9, 補題 3.10, 補題 3.11, 補題 3.13 より, 特異な係数行列に適用した CR 法に関する次の収束定理を得る．(文献 [1] の定理 3.1 と若干異なる.)

定理 3.14 $R(A)^{\perp} = \ker A$ 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

$$\frac{{\|\boldsymbol{r}_{i+1}\|_2}^2 - \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} {\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2}^2}{{\|\boldsymbol{r}_i\|_2}^2 - \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} {\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2}^2} \leq 1 - \frac{\{\lambda_{\min}^{+}(M(A))\}^2}{\lambda_{\max}(A^{\mathrm{T}} A)} \tag{3.14}$$

が成り立つ.

2. 全ての $i \geq 0$ に対して $A\boldsymbol{p}_i \neq \mathbf{0}$, かつ $A\boldsymbol{r}_i \neq \mathbf{0}$ であって, 式 (3.14) が成り立つ. □

[**注意**] 補題 3.12 より, 上記定理の条件のうち「$A_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1$ の対称部 $M(A_{11})$ が定値」は「$M(A)$ が半定値かつ $\operatorname{rank} M(A) = \operatorname{rank} A$」で置き換えることができる.

さらに, 補題 2.3 に注意すると, 定理 3.14 を利用して, [1] と同様にして一般の実正方行列 A に関して, 任意の右辺 $\boldsymbol{b}$ に対して CR 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. (ただし, C4 の条件は本論文で新たに加えた.)

定理 3.15 以下の C1–C4 は同値である.

(C1) 任意の右辺項 $\boldsymbol{b}$ (ただし, 初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ は固定する) に対して,
CR 法は破綻せず, かつ残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束する.

(C2) 任意の右辺項 $\boldsymbol{b}$ (ただし, 初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ は固定する) に対して,
CR 法は破綻しない.

(C3) $A_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1$ の対称部 $M(A_{11})$ が定値, かつ $R(A)^{\perp} = \ker A$ である.

(C4) A の対称部 $M(A)$ が半定値, かつ $\operatorname{rank} M(A) = \operatorname{rank} A$,
かつ $R(A)^{\perp} = \ker A$ である. □

[**証明**] (C3 $\Longleftrightarrow$ C4 以外は文献 [1] の定理 3.3 の証明とほぼ同じ.)

C1 $\Longrightarrow$ C2 は自明.

C2 $\Longrightarrow$ C3 を対偶によって示す. すなわち, 「$M(A_{11})$ が定値でない, または $R(A)^{\perp} \neq \ker A$ ならば, ある右辺項 $\boldsymbol{b}$ に対して CR 法が破綻する」ことを示す.

(**ケース 1**) $M(A_{11})$ が定値でない場合.

$M(A_{11})$ が定値でないと仮定すると, 補題 2.3 より ${}^{\exists}\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$; $(\boldsymbol{v}, A_{11}\boldsymbol{v}) = 0$. そこで, このような $\boldsymbol{v}$ に対して右辺項 $\boldsymbol{b}$ を

$$\boldsymbol{b} = Q \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^1 \\ \boldsymbol{b}^2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^1 \\ \boldsymbol{b}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v} + {Q_1}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x}_0 \\ {Q_2}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x}_0 \end{bmatrix}$$

ととれば,

$$\boldsymbol{r}_0^1 = {Q_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r}_0 = {Q_1}^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{b}^1 - {Q_1}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{v},$$

$$\boldsymbol{r}_0^2 = {Q_2}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r}_0 = {Q_2}^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{b}^2 - {Q_2}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x}_0 = \mathbf{0}$$

とできる. このとき,

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{p}_0) &= (\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{r}_0) = {\boldsymbol{r}_0}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{r}_0 = (Q\tilde{\boldsymbol{r}}_0)^{\mathrm{T}} A Q \tilde{\boldsymbol{r}}_0 \\ &= \left[{\boldsymbol{r}_0^1}^{\mathrm{T}}, {\boldsymbol{r}_0^2}^{\mathrm{T}}\right] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_0^1 \\ \boldsymbol{r}_0^2 \end{bmatrix} = \left[{\boldsymbol{r}_0^1}^{\mathrm{T}}, {\boldsymbol{r}_0^2}^{\mathrm{T}}\right] \begin{bmatrix} A_{11}\boldsymbol{r}_0^1 + A_{12}\boldsymbol{r}_0^2 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

$$= (\boldsymbol{r}_0^1, A_{11}\boldsymbol{r}_0^1 + A_{12}\boldsymbol{r}_0^2) = (\boldsymbol{r}_0^1, A_{11}\boldsymbol{r}_0^1) + (\boldsymbol{r}_0^1, A_{12}\boldsymbol{r}_0^2) = (\boldsymbol{v}, A_{11}\boldsymbol{v}) = 0.$$

今, $\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0} \Longrightarrow \tilde{\boldsymbol{r}}_0 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \neq \boldsymbol{0} \Longrightarrow \boldsymbol{r}_0 = Q\tilde{\boldsymbol{r}}_0 \neq \boldsymbol{0}$ である. 従って, もし $\boldsymbol{r}_0 \neq \boldsymbol{0}$ にもかかわらず, $(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0) = 0$ とすると, (2.2) の CR 法は $i = 0$ で破綻する.

一方, $(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0) \neq 0$ とすると, $\alpha_0 = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{p}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)} = 0$, 従って $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{p}_0 \neq \boldsymbol{0}$, $\beta_0 = -\dfrac{(A\boldsymbol{r}_1, A\boldsymbol{p}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)} = -\dfrac{(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)} = -1$, $\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{r}_1 + \beta_0\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{p}_0 - \boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{0}$ となる. 従って, CR 法は, $i = 1$ において $\boldsymbol{r}_1 \neq \boldsymbol{0}$ にもかかわらず, α_1 の分母 $(A\boldsymbol{p}_1, A\boldsymbol{p}_1) = 0$ となり, 破綻する.

(**ケース 2**) $M(A_{11})$ が定値, かつ $R(A)^\perp \neq \ker A$ の場合.

定理3.2 より $A_{12} \neq 0$. 従って, $^\exists i, j$; $(A_{12})_{i,j} \neq 0$. そこで, $\boldsymbol{v}_1 = (v_{1,1}, \ldots, v_{1,k}, \ldots, v_{1,r})^{\mathrm{T}}$; $v_{1,k} = \delta_{ik}$, 及び $\boldsymbol{v}_2 = (v_{2,1}, \ldots, v_{2,k}, \ldots, v_{2,n-r})^{\mathrm{T}}$; $v_{2,k} = \delta_{jk}$ とおくと,
$\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} A_{12}\boldsymbol{v}_2 = (A_{12})_{i,j} \neq 0$. つまり, $(\boldsymbol{v}_1, A_{12}\boldsymbol{v}_2) \neq 0$ となるような $\boldsymbol{v}_1 \neq \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{v}_2 \neq \boldsymbol{0}$ が存在する.

そこで, このような $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ に対して, 右辺項 $\boldsymbol{b}$ を

$$\boldsymbol{b} = Q\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^1 \\ \boldsymbol{b}^2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^1 \\ \boldsymbol{b}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 + {Q_1}^{\mathrm{T}} A\boldsymbol{x}_0 \\ \epsilon\boldsymbol{v}_2 + {Q_2}^{\mathrm{T}} A\boldsymbol{x}_0 \end{bmatrix}$$

ととれば,

$$\boldsymbol{r}_0^1 = {Q_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_0 = {Q_1}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{b}^1 - {Q_1}^{\mathrm{T}} A\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{v}_1,$$
$$\boldsymbol{r}_0^2 = {Q_2}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_0 = {Q_2}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{b}^2 - {Q_2}^{\mathrm{T}} A\boldsymbol{x}_0 = \epsilon\boldsymbol{v}_2$$

となる. そこで, $\epsilon = -\dfrac{(\boldsymbol{v}_1, A_{11}\boldsymbol{v}_1)}{(\boldsymbol{v}_1, A_{12}\boldsymbol{v}_2)}$ とおくと,

$$(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{p}_0) = (\boldsymbol{r}_0^1, A_{11}\boldsymbol{r}_0^1) + (\boldsymbol{r}_0^1, A_{12}\boldsymbol{r}_0^2) = (\boldsymbol{v}_1, A_{11}\boldsymbol{v}_1) + \epsilon(\boldsymbol{v}_1, A_{12}\boldsymbol{v}_2) = 0$$

となる.

今, $\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{v}_1 \neq \boldsymbol{0} \Longrightarrow \boldsymbol{r}_0 = Q\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}_0^1 \\ \boldsymbol{r}_0^2 \end{bmatrix} \neq \boldsymbol{0}$. 従って, $A\boldsymbol{p}_0 = A\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{0}$ とすると, (2.2) の CR 法は $i = 0$ で破綻する.

一方, $A\boldsymbol{p}_0 \neq \boldsymbol{0}$ とすると, $\alpha_0 = 0$, 従って $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{p}_0 \neq \boldsymbol{0}$,
$\beta_0 = -\dfrac{(A\boldsymbol{r}_1, A\boldsymbol{p}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)} = -1$, $\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{r}_1 + \beta_0\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{p}_0 - \boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{0}$ となり, CR 法は, $i = 1$ において $\boldsymbol{r}_1 \neq \boldsymbol{0}$ にもかかわらず, α_1 の分母が 0 となり, 破綻する.

従って, C2 $\Longrightarrow$ C3 が示された.

C3 $\Longrightarrow$ C1 が補題 3.9 (定理 3.14) であった.

また, C3 $\Longleftrightarrow$ C4　は補題 3.12 による.

従って, C1–C4 は同値である. ∎

本論文ではさらに, $R(A) = \ker A$ の場合に, 任意の初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して CR 法が破綻せず, かつ残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束するための以下の必要十分条件に関する次の定理を示す.

定理 3.16 $R(A)^{\perp} = \ker A$ のとき, C1–C4 は同値である.

(C1) 任意の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, CR 法は破綻せず,
かつ残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束する.

(C2) 任意の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, CR 法は破綻しない.

(C3) $A_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1$ の対称部 $M(A_{11})$ が定値である.

(C4) $M(A)$ が半定値かつ $\mathrm{rank}\, M(A) = \mathrm{rank} A$ である. □

[**証明**] C1 $\Longrightarrow$ C2 は自明.

C2 $\Longrightarrow$ C3 を対偶によって示す. すなわち,「 $A_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}} A Q_1$ の対称部 $M(A_{11})$ が定値でない $\Longrightarrow$ ある初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して CR 法が破綻する」を示す.

$M(A_{11})$ が定値でないと仮定すると, 補題 2.3 より $^{\exists}\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$; $(\boldsymbol{v}, A_{11}\boldsymbol{v}) = 0$. そこで, このような $\boldsymbol{v}$ に対して,「$R(A)^{\perp} = \ker A \Longrightarrow A_{11}$: 正則」(系 3.3) より, $\boldsymbol{x}_0^1 = {A_{11}}^{-1}(\boldsymbol{b}^1 - \boldsymbol{v})$ とおき, 初期解として $\boldsymbol{x}_0 = Q\tilde{\boldsymbol{x}}_0 = Q\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0^1 \\ \boldsymbol{x}_0^2 \end{bmatrix}$ となるようなものを選ぶと, $A_{11}\boldsymbol{x}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - \boldsymbol{v}$ より, $\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - A_{11}\boldsymbol{x}_0^1 = \boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ となる. 従って, $\boldsymbol{p}_0^1 = \boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ より
$(\boldsymbol{r}_0^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1) = (\boldsymbol{v}, A_{11}\boldsymbol{v}) = 0$ を得る.

ここで, A_{11} は正則, $\boldsymbol{p}_0^1 \neq \mathbf{0}$ より $A_{11}\boldsymbol{p}_0^1 \neq \mathbf{0}$ である. 従って, $(A_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1) > 0$ より
$\alpha_0 = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1)}{(A_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1)} = 0$ となり, $\boldsymbol{r}_1^1 = \boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{p}_0^1$ となる. すると,
$\beta_0 = -\dfrac{(A_{11}\boldsymbol{r}_1^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1)}{(A_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1)} = -\dfrac{(A_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1)}{(A_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A_{11}\boldsymbol{p}_0^1)} = -1$ となるので,
結局 $\boldsymbol{p}_1^1 = \boldsymbol{r}_1^1 + \beta_0\boldsymbol{p}_0^1 = \boldsymbol{p}_0^1 - \boldsymbol{p}_0^1 = \mathbf{0}$ となる. 従って, $i = 1$ において $\boldsymbol{r}_1^1 = \boldsymbol{r}_0^1 \neq \mathbf{0}$ で残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束していないにもかかわらず, α_1 の分母 $(A_{11}\boldsymbol{p}_1^1, A_{11}\boldsymbol{p}_1^1) = 0$ となり, CR 法のアルゴリズムは破綻する.

よって, C2 $\Longrightarrow$ C3 が示された.

C3 $\Longrightarrow$ C1 が補題 3.9 (定理 3.14) であった.

また, C3 $\Longleftrightarrow$ C4 は補題 3.12 による.

従って, C1–C4 は同値である. ∎

[**注意**] 係数行列 A が正則な場合も補題 3.8 より $R(A)^{\perp} = \ker A$ が成り立つので, 定理 3.15 は A が特異なときばかりでなく, 正則な場合も成り立つ. A が正則な場合は以下の

補題 3.17 により, $M(A_{11}) = M(Q^{\mathrm{T}}AQ)$: 定値 $\Longleftrightarrow$ $M(A)$: 定値となり, 定理 3.15 は A が正則な場合の定理 2.4 に帰着する.

補題 3.17 Q を直交行列とすると, $M(Q^{\mathrm{T}}AQ)$: 定値 $\Longleftrightarrow$ $M(A)$: 定値. □

[**証明**] $(\boldsymbol{x}, M(A)\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ より,
$M(A)$ が正定値 $\Longleftrightarrow (\boldsymbol{x}, M(A)\boldsymbol{x}) > 0 \quad {}^{\forall}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \Longleftrightarrow (\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) > 0 \quad {}^{\forall}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$
$\Longleftrightarrow A$: 正定値.
従って,
$M(Q^{\mathrm{T}}AQ)$: 正定値 $\Longleftrightarrow Q^{\mathrm{T}}AQ$: 正定値 $\Longleftrightarrow (\boldsymbol{x}, Q^{\mathrm{T}}AQ\boldsymbol{x}) = (Q\boldsymbol{x}, AQ\boldsymbol{x}) > 0 \quad {}^{\forall}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$
$\Longleftrightarrow (\boldsymbol{y}, A\boldsymbol{y}) > 0 \quad {}^{\forall}\boldsymbol{y} \neq \boldsymbol{0} \Longleftrightarrow A$: 正定値 $\Longleftrightarrow M(A)$: 正定値.
負定値の場合も同様. ∎

[**注意**] [3] では $R(A)^{\perp} = \ker A$ が GMRES 法が任意の初期近似解に対して破綻せずに最小二乗解に収束するための必要十分条件であることを導いている.

最後に, CR 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 3.18 $R(A)^{\perp} = \ker A$ のとき, CR 法で残差の $R(A)$ 成分が $\boldsymbol{0}$ 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 $\boldsymbol{x}_0^2 = \boldsymbol{0}$ (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.) □

[**証明**] $R(A)^{\perp} = \ker A$ の場合の分離された CR 法のアルゴリズム (3.9) の $R(A)$ 成分は $A_{11}\boldsymbol{x}^1 = \boldsymbol{b}^1$ に CR 法を適用したものと考えられ, そのとき A_{11} は正則であるから, CR 法で残差の $R(A)$ 成分が $\boldsymbol{0}$ 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.

また, さらに $\boldsymbol{b} \in R(A)$ ならば, 分離された CR 法のアルゴリズム (3.9) の $\ker A$ 成分において $\boldsymbol{b}^2 = \boldsymbol{0}$ だから $\boldsymbol{p}_i^2 \equiv \boldsymbol{0}\,(i \geq 0)$, 従って $\boldsymbol{x}_i^2 \equiv \boldsymbol{x}_0^2\,(i \geq 0)$ である. よって, CR 法の近似解 $\boldsymbol{x}_i = Q_1\boldsymbol{x}_i^1 + Q_2\boldsymbol{x}_i^2$ 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 $\boldsymbol{x}_0^2 = \boldsymbol{0}$ ならば, $\boldsymbol{x}_i^2 \equiv \boldsymbol{x}_0^2 = \boldsymbol{0}\,(i \geq 0)$ より, $\boldsymbol{x}_i$ は $Q_1A_{11}^{-1}Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ に収束する. ところで, $\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}^1\|_2^2 + \|\boldsymbol{x}^2\|_2^2$ だから, 収束解を $\boldsymbol{x}_*$ とおくと, $\|\boldsymbol{x}_*\|_2^2 = \|{A_{11}}^{-1}\boldsymbol{b}^1\|_2^2 + \|\boldsymbol{x}_0^2\|_2^2$ だから, これは, 解のノルムが最小の最小二乗解 (擬逆解) になっている. ∎

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 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$ とおけば, CR 法による近似解は擬逆解に収束する. なお, 定理 3.18 と同様のことが GMRES 法に対して [3] で示されている.

3.4 $R(A)^\perp \neq \ker A$ の場合の収束定理

次に, [1] の拡張として $R(A)^\perp \neq \ker A$ 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 CR 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 3.19

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

□

[**証明**]

$$Q^{\mathrm{T}}AU = \begin{bmatrix} {Q_1}^{\mathrm{T}} \\ {Q_2}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} A\,[U_1 U_2] = \begin{bmatrix} {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_1 & {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_2 \\ {Q_2}^{\mathrm{T}}AU_1 & {Q_2}^{\mathrm{T}}AU_2 \end{bmatrix}$$

において, $U_2 : \ker A \Longrightarrow AU_2 = 0 \Longrightarrow {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_2 = 0,\ \ {Q_2}^{\mathrm{T}}AU_2 = 0.$

また, $AU_1 \subset R(A),\ \ Q_2 : R(A)^\perp \Longrightarrow {Q_2}^{\mathrm{T}}AU_1 = 0.$ ∎

補題 3.20 $A'_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_1$ は $r \times r$ の正則行列である. □

[**証明**] $A'_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_1 = \left[{Q_1}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{u}_1, \cdots, {Q_1}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{u}_r\right]$ より,

$$A'_{11}\text{が正則} \Longleftrightarrow \left[\sum_{i=1}^{r} c_i({Q_1}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{u}_i) = 0 \Longrightarrow c_i = 0 \quad (1 \leq i \leq r)\right]$$

である. ところで,

$$\sum_{i=1}^{r} c_i({Q_1}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{u}_i) = {Q_1}^{\mathrm{T}}A(\sum_{i=1}^{r} c_i\boldsymbol{u}_i)\,,$$

$$R(A) \ni A(\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{u}_i) = \sum_{i=1}^{r} d_i \boldsymbol{q}_i$$

に注意すると,

$$\sum_{i=1}^{r} c_i ({Q_1}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{u}_i) = {Q_1}^{\mathrm{T}} \sum_{i=1}^{r} d_i \boldsymbol{q}_i = \begin{bmatrix} {\boldsymbol{q}_1}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ {\boldsymbol{q}_r}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \sum_{i=1}^{r} d_i \boldsymbol{q}_i = \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_r \end{bmatrix}$$

を得る. 従って,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{r} c_i ({Q_1}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{u}_i) = \boldsymbol{0} \quad &\Longleftrightarrow \quad \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad A\left(\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{u}_i\right) = \boldsymbol{0} \quad \Longleftrightarrow \\ \sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{u}_i \in \ker A \quad &\Longleftrightarrow \quad \sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{u}_i = \sum_{j=r+1}^{n} c'_j \boldsymbol{u}_j \quad \Longrightarrow \quad c_1 = \cdots = c_r = 0 \end{aligned}$$

を得る. (最後の $\Longrightarrow$ は $\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_n$ の一次独立性による.) 従って A'_{11} は正則である. ∎

そこで, (2.2) の CR 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

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

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

(3.15)

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,

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

より

$$\tilde{\boldsymbol{r}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^1 \\ \boldsymbol{r}^2 \end{bmatrix} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r} = Q^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} - Q^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^1 - A'_{11} \boldsymbol{x}^1 \\ \boldsymbol{b}^2 \end{bmatrix}$$

を得る.

変換 (3.5),(3.15) を (2.2) の CR 法のアルゴリズムに適用する. その際,

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

$$\Longleftrightarrow \boldsymbol{p}_{i+1}^1 = {U_1}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_{i+1}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2) + \beta_i\boldsymbol{p}_i^1\,, \quad \boldsymbol{p}_{i+1}^2 = {U_2}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_{i+1}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2) + \beta_i\boldsymbol{p}_i^2\,,$$

及び,

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

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

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

などに注意すると CR 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 CR 法のアルゴリズム ($R(A)^{\perp} \neq \ker A$ も含めた一般の場合)

初期近似解$\boldsymbol{x}_0$を選ぶ.

$$\boldsymbol{b}^1 = {Q_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \qquad \boldsymbol{b}^2 = {Q_2}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$
$$\boldsymbol{x}_0^1 = {U_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0 \qquad \boldsymbol{x}_0^2 = {U_2}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_0$$
$$\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - A'_{11}\boldsymbol{x}_0^1 \qquad \boldsymbol{r}_0^2 = \boldsymbol{b}^2$$
$$\boldsymbol{p}_0^1 = {U_1}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_0^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2) \qquad \boldsymbol{p}_0^2 = {U_2}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_0^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2)$$

$i = 0, 1, \ldots$ に対して残差の $R(A)$ 成分 $(\boldsymbol{r}^1)$ が収束するまで以下を繰り返す.

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

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

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

$$\boldsymbol{p}_{i+1}^1 = {U_1}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_{i+1}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2) + \beta_i\boldsymbol{p}_i^1 \qquad \boldsymbol{p}_{i+1}^2 = {U_2}^{\mathrm{T}}(Q_1\boldsymbol{r}_{i+1}^1 + Q_2\boldsymbol{b}^2) + \beta_i\boldsymbol{p}_i^2$$

上記のアルゴリズムの左側の成分に着目すると, β_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と次のように簡単になる.

部分的に分離された CR 法のアルゴリズム

$(R(A)^{\perp} \neq \ker A$ も含めた一般の場合で $\boldsymbol{b} \in R(A)$ の場合)

初期近似解$\boldsymbol{x}_0$を選ぶ.

$$
\begin{array}{ll}
\boldsymbol{b}^1 = {Q_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} & \boldsymbol{b}^2 = {Q_2}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \\
\boldsymbol{x}_0^1 = {U_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_0 & \boldsymbol{x}_0^2 = {U_2}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_0 \\
\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - A'_{11} \boldsymbol{x}_0^1 & \boldsymbol{r}_0^2 = \boldsymbol{b}^2 = \boldsymbol{0} \\
\boldsymbol{p}_0^1 = {U_1}^{\mathrm{T}} Q_1 \boldsymbol{r}_0^1 & \boldsymbol{p}_0^2 = {U_2}^{\mathrm{T}} Q_1 \boldsymbol{r}_0^1
\end{array}
$$

$i = 0, 1, \ldots$ に対して残差の $R(A)$ 成分 $(\boldsymbol{r}^1)$ が収束するまで以下を繰り返す.

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

$$
\begin{array}{ll}
\boldsymbol{x}_{i+1}^1 = \boldsymbol{x}_i^1 + \alpha_i \boldsymbol{p}_i^1 & \boldsymbol{x}_{i+1}^2 = \boldsymbol{x}_i^2 + \alpha_i \boldsymbol{p}_i^2 \\
\boldsymbol{r}_{i+1}^1 = \boldsymbol{r}_i^1 - \alpha_i A'_{11} \boldsymbol{p}_i^1 & \boldsymbol{r}_{i+1}^2 = \boldsymbol{b}^2 = \boldsymbol{0}
\end{array}
$$

$$
\beta_i = -\frac{(A'_{11} {U_1}^{\mathrm{T}} Q_1 \boldsymbol{r}_{i+1}^1,\, A'_{11} \boldsymbol{p}_i^1)}{(A'_{11} \boldsymbol{p}_i^1,\, A'_{11} \boldsymbol{p}_i^1)}
$$

$$
\begin{array}{ll}
\boldsymbol{p}_{i+1}^1 = {U_1}^{\mathrm{T}} Q_1 \boldsymbol{r}_{i+1}^1 + \beta_i \boldsymbol{p}_i^1 & \boldsymbol{p}_{i+1}^2 = {U_2}^{\mathrm{T}} Q_1 \boldsymbol{r}_{i+1}^1 + \beta_i \boldsymbol{p}_i^2
\end{array}
$$

(3.16)

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

$$
A := A'_{11} = {Q_1}^{\mathrm{T}} A U_1, \quad B := {U_1}^{\mathrm{T}} Q_1 \in \mathbf{R}^{r \times r}
$$

及び

$$
\boldsymbol{x} := \boldsymbol{x}^1, \quad \boldsymbol{p} := \boldsymbol{p}^1, \quad \boldsymbol{r} := \boldsymbol{r}^1 \in \mathbf{R}^r
$$

とおくと次のような $\mathbf{R}^r$ での「修正された」CR 法のアルゴリズムを得る.

修正された CR 法のアルゴリズム

初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ を選ぶ.
$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$
$\boldsymbol{p}_0 = B\boldsymbol{r}_0$
$i = 0, 1, \ldots$ に対して残差 $(\boldsymbol{r})$ が収束するまで以下を繰り返す.

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

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

$$\beta_i = -\frac{(AB\boldsymbol{r}_{i+1}, A\boldsymbol{p}_i)}{(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i)}$$

$$\boldsymbol{p}_{i+1} = B\boldsymbol{r}_{i+1} + \beta_i \boldsymbol{p}_i$$

(3.17)

(上記の修正された CR 法のアルゴリズムで $B = I$ とおいたものが (2.2) の標準的な CR 法に相当する.)

ここで次の補題が成り立つ.

補題 3.21 ${U_1}^{\mathrm{T}} Q_1$: 正則 $\iff R(A)^{\perp} \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$. □

[**証明**]

$${U_1}^{\mathrm{T}} Q_1 = \left[{U_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_1, \cdots, {U_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_r \right] : \text{正則}$$
$$\iff \left[\sum_{i=1}^{r} c_i ({U_1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_i) = {U_1}^{\mathrm{T}} \left(\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i \right) = \boldsymbol{0} \implies c_1 = \cdots = c_r = 0 \right]$$
$$\iff \left[\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i \in R(A) \cap \ker A \implies \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \right]$$
$$\iff R(A) \cap \ker A = \{\boldsymbol{0}\}$$
$$\iff \left[\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i = \sum_{j=r+1}^{n} d_j \boldsymbol{u}_j \implies \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \right]$$
$$\iff \left[\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{q}_i - \sum_{j=r+1}^{n} d_j \boldsymbol{u}_j = \boldsymbol{0} \implies c_1 = \cdots c_r = d_{r+1} = \cdots d_n = 0 \right]$$
$$\iff \boldsymbol{q}_1, \cdots, \boldsymbol{q}_r, \boldsymbol{u}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{u}_n \ \text{は一次独立}$$
$$\iff R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n . \qquad \blacksquare$$

さらに以下の補題が成り立つ. (注: (2.2) の標準的な CR 法では以下で $B = I$ とおいた補題が成り立つ [7].)

補題 3.22 修正されたCR法(3.17)において

(1) $(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) = 0 \quad (i \geq 1)$,

(2) $(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i) \leq (AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i) \quad (i \geq 0)$,

(3) $(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) = 0 \quad (i \geq 1)$,

(4) $(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_i) = (\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i) \quad (i \geq 0)$

が成り立つ. □

[**証明**]

(1) $i \geq 1$ に対して, $\boldsymbol{p}_i = B\boldsymbol{r}_i + \beta_{i-1}\boldsymbol{p}_{i-1}$ より $A\boldsymbol{p}_i = AB\boldsymbol{r}_i + \beta_{i-1}A\boldsymbol{p}_{i-1}$ を得る. 従って, $i \geq 1$ に対して

$$\begin{aligned}
(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) &= (AB\boldsymbol{r}_i + \beta_{i-1}A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= (AB\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) + \beta_{i-1}(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= (AB\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) - \frac{(AB\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1})}{(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1})}(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= 0
\end{aligned}$$

を得る.

(2) (1)と同様にして $i \geq 1$ に対して

$$\begin{aligned}
(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i) &= (AB\boldsymbol{r}_i + \beta_{i-1}A\boldsymbol{p}_{i-1}, AB\boldsymbol{r}_i + \beta_{i-1}A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= (AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i) + 2\beta_{i-1}(AB\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) + \beta_{i-1}^2(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= (AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i) - \frac{2(AB\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1})^2}{(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1})} + \frac{(AB\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1})^2}{(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1})^2}(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= (AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i) - \frac{(AB\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1})^2}{(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1})} \\
&\leq (AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i).
\end{aligned}$$

ただし, 最後の不等式で $A := A'_{11}$: 正則, $\boldsymbol{p}_{i-1} \neq \boldsymbol{0}$ を用いた. また, $\boldsymbol{p}_{i-1} = \boldsymbol{0}$ のときは, $\boldsymbol{p}_i = B\boldsymbol{r}_i \Longrightarrow A\boldsymbol{p}_i = AB\boldsymbol{r}_i \Longrightarrow (A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i) = (AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i)$.

また, $i = 0$ のときは $\boldsymbol{p}_0 = B\boldsymbol{r}_0$ より $(A\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0) = (AB\boldsymbol{r}_0, AB\boldsymbol{r}_0)$.

(3) $i \geq 1$ に対して $\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_{i-1} - \alpha_{i-1}A\boldsymbol{p}_{i-1}$ より

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) &= (\boldsymbol{r}_{i-1} - \alpha_{i-1}A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= (\boldsymbol{r}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) - \alpha_{i-1}(A\boldsymbol{p}_{i-1}, A\boldsymbol{p}_{i-1}) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

(4) $i = 0$ のときは, $\boldsymbol{p}_0 = B\boldsymbol{r}_0$ より $(\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{p}_0) = (\boldsymbol{r}_0, AB\boldsymbol{r}_0)$.

$i \geq 1$ のときは, $\boldsymbol{p}_i = B\boldsymbol{r}_i + \beta_{i-1}\boldsymbol{p}_{i-1}$ より $A\boldsymbol{p}_i = AB\boldsymbol{r}_i + \beta_{i-1}A\boldsymbol{p}_{i-1}$. 従って, $(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_i) = (\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i) + \beta_{i-1}(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_{i-1}) = (\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i)$. ただし, 最後の等号は上記(3)による. ∎

上記の補題3.22を用いると次の補題を得る.

補題 3.23 修正されたCR法(3.17)において

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

が成り立つ. ただし, $C := AB$ である. □

[**証明**] まず, 修正されたCR法のアルゴリズム(3.17)より,

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{r}_{i+1}\|_2{}^2 &= (\boldsymbol{r}_{i+1}, \boldsymbol{r}_{i+1}) \\
&= (\boldsymbol{r}_i - \alpha_i A\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{r}_i - \alpha_i A\boldsymbol{p}_i) \\
&= \|\boldsymbol{r}_i\|_2{}^2 - 2\alpha_i(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_i) + \alpha_i{}^2(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i) \\
&= \|\boldsymbol{r}_i\|_2{}^2 - \frac{(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_i)^2}{(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i)}.
\end{aligned}$$

従って, 補題3.22の(4),(2)より

$$\begin{aligned}
\frac{\|\boldsymbol{r}_{i+1}\|_2{}^2}{\|\boldsymbol{r}_i\|_2{}^2} &= 1 - \frac{(\boldsymbol{r}_i, A\boldsymbol{p}_i)^2}{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i)} \\
&= 1 - \frac{(\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i)^2}{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)(A\boldsymbol{p}_i, A\boldsymbol{p}_i)} \\
&\leq 1 - \frac{(\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i)^2}{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)(AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i)} \\
&= 1 - \left\{\frac{(\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i)}{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)}\right\}^2 \frac{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)}{(AB\boldsymbol{r}_i, AB\boldsymbol{r}_i)} \\
&= 1 - \left\{\frac{(\boldsymbol{r}_i, C\boldsymbol{r}_i)}{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)}\right\}^2 \frac{(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)}{(C\boldsymbol{r}_i, C\boldsymbol{r}_i)}
\end{aligned}$$

を得る. ▮

さらに, 次の補題を得る.

補題 3.24 修正されたCR法(3.17)において

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

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

[**証明**] $M = M^{\mathrm{T}}$ より, ${}^{\exists}U = [\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_r] \in \mathbf{R}^{r\times r}$; $U^{\mathrm{T}}U = I$,

$$U^{-1}MU = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \text{\Large 0} \\ & \ddots & \\ \text{\Large 0} & & \lambda_r \end{bmatrix}.$$

つまり, $M\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i \ \ (1 \leq i \leq r)$.

そこで, $\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{u}_i$ とおくと, $M\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{r} c_i \lambda_i \boldsymbol{u}_i$ となるから,

$$(\boldsymbol{r}, C\boldsymbol{r}) = (\boldsymbol{r}, M\boldsymbol{r}) = (\sum_{i=1}^{r} c_i \boldsymbol{u}_i \, , \sum_{j=1}^{r} c_j \lambda_j \boldsymbol{u}_j \,) = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i {c_i}^2,$$

$$(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{r} {c_i}^2$$

より

$$\frac{(\boldsymbol{r}, C\boldsymbol{r})}{(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})} = \frac{\sum_{i=1}^{r} \lambda_i {c_i}^2}{\sum_{j=1}^{r} {c_j}^2}$$

を得る. ここで, 一般性を失うことなく $\sum_{j=1}^{r} {c_j}^2 = 1$ とおくと,

$$\left\{ \frac{(\boldsymbol{r}, C\boldsymbol{r})}{(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})} \right\}^2 = \left(\sum_{i=1}^{r} \lambda_i {c_i}^2 \right)^2 \geq \lambda_{\min}(M)^2$$

を得る.

同様にして

$$\frac{(C\boldsymbol{r}, C\boldsymbol{r})}{(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})} = \frac{(\boldsymbol{r}, C^{\mathrm{T}} C\boldsymbol{r})}{(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})} \leq \lambda_{\max}(C^{\mathrm{T}} C),$$

従って

$$\frac{1}{\lambda_{\max}(C^{\mathrm{T}} C)} \leq \frac{(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})}{(\boldsymbol{r}, C^{\mathrm{T}} C\boldsymbol{r})}$$

を得る.

以上をまとめると,

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

を得る. ∎

以上より $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$, $\boldsymbol{b} \in R(A)$ の場合の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 3.25 $A'_{11} = {Q_1}^{\mathrm{T}} A U_1, \quad B := {U_1}^{\mathrm{T}} Q_1, \quad C := A'_{11} B, \quad M(C) := \dfrac{C + C^{\mathrm{T}}}{2}$ とする. このとき, $M(C)$ が定値かつ $\boldsymbol{b} \in R(A)$ ならば, 部分的に分離された CR 法のアルゴリズム (3.16) において次のいずれかが成り立つ.

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

$$\frac{{\|\boldsymbol{r}_{i+1}^1\|_2}^2}{{\|\boldsymbol{r}_i^1\|_2}^2} \le 1 - \frac{\{\lambda_{\min}(M(C))\}^2}{\lambda_{\max}(C^{\mathrm{T}}C)} \tag{3.18}$$

が成り立つ.

2. 全ての $i \ge 0$ に対して $\boldsymbol{p}_i^1 \ne \boldsymbol{0}$, かつ $\boldsymbol{r}_i^1 \ne \boldsymbol{0}$ であって, 式 (3.18) が成り立つ. □

[**証明**]　部分的に分離された CR 法のアルゴリズム (3.16) が破綻しないこと, つまり, $\boldsymbol{r}_l^1 \ne \boldsymbol{0} \Longrightarrow \boldsymbol{p}_l^1 \ne \boldsymbol{0}$ $(l \ge 0)$, あるいはその対偶: $\boldsymbol{p}_l^1 = \boldsymbol{0} \Longrightarrow \boldsymbol{r}_l^1 = \boldsymbol{0}$ を示せばよい. これは以下により示される. まず, 補題 3.22 より
$(\boldsymbol{r}_l^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_l^1) = (\boldsymbol{r}_l^1, A'_{11}B\boldsymbol{r}_l^1) = (\boldsymbol{r}_l^1, C\boldsymbol{r}_l^1) = (\boldsymbol{r}_l^1, M\boldsymbol{r}_l^1)$.
従って $\boldsymbol{p}_l^1 = \boldsymbol{0}$ ならば $(\boldsymbol{r}_l^1, M\boldsymbol{r}_l^1) = \boldsymbol{0}$ であるが, M は定値の仮定より $\boldsymbol{r}_l^1 = \boldsymbol{0}$ を得る. ∎

最後に, 特異な系に対する次の収束定理を得る.

定理 3.26 $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$, $\boldsymbol{b} \in R(A)$ のとき, C1–C3 は同値である.

(C1)　任意の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, CR 法は破綻せず, かつ残差の $R(A)$ 成分が $\boldsymbol{0}$ に収束する.

(C2)　任意の初期解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して, CR 法は破綻しない.

(C3)　$M(C)$ が定値である.
ただし, $M(C) := \dfrac{C + C^{\mathrm{T}}}{2}$, $C := A'_{11}B$, $A'_{11} := {Q_1}^{\mathrm{T}}AU_1$, $B := {U_1}^{\mathrm{T}}Q_1$ である. □

[**証明**]　C1 $\Longrightarrow$ C2 は自明.

C2 $\Longrightarrow$ C3 を対偶によって示す. すなわち,「 $M(C)$ が定値でない $\Longrightarrow$ ある初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して CR 法が破綻する」を示す.

$M(A_{11})$ が定値でないと仮定すると, 補題 2.3 より $^{\exists}\boldsymbol{v} \ne \boldsymbol{0}$; $(\boldsymbol{v}, C\boldsymbol{v}) = 0$. そこで, このような $\boldsymbol{v}$ に対して, 補題 3.20 より A'_{11} は正則なので, 修正された CR 法 (3.17) において $\boldsymbol{x}_0^1 = {A'_{11}}^{-1}(\boldsymbol{b}^1 - \boldsymbol{v})$ とおくと, CR 初期解は $\boldsymbol{x}_0 = U\tilde{\boldsymbol{x}}_0 = U\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0^1 \\ \boldsymbol{x}_0^2 \end{bmatrix}$ となり, $A'_{11}\boldsymbol{x}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - \boldsymbol{v}$ より, $\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{b}^1 - A'_{11}\boldsymbol{x}_0^1 = \boldsymbol{v} \ne \boldsymbol{0}$ となる. ここで, 補題 3.21 より $B = U_1^{\mathrm{T}}Q_1$ は正則だから $\boldsymbol{p}_0^1 = B\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{v} \ne \boldsymbol{0}$ となる. 従って $(\boldsymbol{r}_0^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1) = (\boldsymbol{v}, A'_{11}\boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{v}, C\boldsymbol{v}) = 0$ を得る.

ここで, A'_{11} は正則, $\boldsymbol{p}_0^1 \ne \boldsymbol{0}$ より $A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1 \ne \boldsymbol{0}$ である. 従って, $(A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1) > 0$ より $\alpha_0 = \dfrac{(\boldsymbol{r}_0^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1)}{(A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1)} = 0$ となり, $\boldsymbol{r}_1^1 = \boldsymbol{r}_0^1$, $B\boldsymbol{r}_1^1 = B\boldsymbol{r}_0^1 = \boldsymbol{p}_0^1$ となる. すると,
$\beta_0 = -\dfrac{(A'_{11}\boldsymbol{r}_1^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1)}{(A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1)} = -\dfrac{(A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1)}{(A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_0^1)} = -1$ となるので,

結局 $\boldsymbol{p}_1^1 = B\boldsymbol{r}_1^1 + \beta_0 \boldsymbol{p}_0^1 = B\boldsymbol{r}_0^1 - B\boldsymbol{r}_0^1 = \mathbf{0}$ となる．従って, $i=1$ において $\boldsymbol{r}_1^1 = \boldsymbol{r}_0^1 \neq \mathbf{0}$ で残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束していないにもかかわらず, α_1 の分母 $(A'_{11}\boldsymbol{p}_1^1, A'_{11}\boldsymbol{p}_1^1) = 0$ となり, CR 法のアルゴリズムは破綻する.
よって, C2 $\Longrightarrow$ C3 が示された.

最後に, C3 $\Longrightarrow$ C1 が補題 3.9 (定理 3.25) であった．従って, C1–C3 は同値である.

∎

[**注意**]　[3] では $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$,　$\boldsymbol{b} \in R(A)$ ならば GMRES 法が任意の初期近似解に対して破綻せずに最小二乗解に収束することを示している.

[**注意**]　$R(A)^{\perp} = \ker A$ のときは $U_1 = Q_1$ ととることができ,
そのとき $B = U_1^{\mathrm{T}} Q_1 = Q_1^{\mathrm{T}} Q_1 = \mathrm{I}_r$　(ただし, I_r は $r \times r$ の単位行列) となる.
また, $A'_{11} = U_1^{\mathrm{T}} A Q_1 = Q_1^{\mathrm{T}} A Q_1 = A_{11}$,　$C = A'_{11} B = A_{11}$,　$M(C) = M(A_{11})$ となる.

ところで, $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$ かつ $\boldsymbol{b} \in R(A)$ の場合で, CR 法により残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束する場合は, 部分的に分離された CR 法のアルゴリズム (3.16) および定理 3.25, 3.26 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.

3.5　収束定理のまとめ

以上 3 章で得られた特異な系に対する CR 法の収束性に関する定理をまとめると次のようになる.

まず, $n \times n$ の実係数行列 A の集合の包含関係は

$$\mathbf{R}^{n \times n} \supset \{A \in \mathbf{R}^{n \times n} | R(A) \oplus \ker(A) = \mathbf{R}^n\} \supset \{A \in \mathbf{R}^{n \times n} | R(A)^{\perp} = \ker A\}$$

となっており,

$$R(A) \oplus \ker(A) = \mathbf{R}^n \iff B := U_1^{\mathrm{T}} Q_1 : \text{正則} \iff A_{11} := Q_1^{\mathrm{T}} A Q_1 : \text{正則}$$

及び

$$R(A)^{\perp} = \ker A \iff A_{12} = 0$$

が成り立つ.

また,
$M(C)$: 定値 $\Longrightarrow C$: 正則 $\Longrightarrow B$: 正則　より $M(C)$: 定値 $\Longrightarrow R(A) \oplus \ker(A) = \mathbf{R}^n$ を得る．従って,

$$\{A \in \mathbf{R}^{n \times n} | M(C) : \text{定値}\} \subset \{A \in \mathbf{R}^{n \times n} | R(A) \oplus \ker(A) = \mathbf{R}^n\}$$

である.

収束性に関しては, まず $R(A)^{\perp} = \ker A$ かつ A の対称部 $M(A)$ が半定値かつ $\mathrm{rank}\,M(A) = \mathrm{rank}A$ ならば CR 法は任意の右辺 $\boldsymbol{b}$ 及び初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して破綻せず, 残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束し, そのとき最小二乗解が得られる. さらに $\boldsymbol{x}_0 \in R(A)$ のときは近似解はノルム最小の最小二乗解 (擬逆解) に収束する.

また, $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$ かつ $M(C)$: 定値かつ $\boldsymbol{b} \in R(A)$ ならば CR 法は任意の初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対して破綻せず, 残差の $R(A)$ 成分が $\mathbf{0}$ に収束し, そのとき最小二乗解が得られる.

3.6 例

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

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

に対して, 境界条件

1. 周期境界条件: $u(0) = u(1)$

または

2. Neumann 境界条件: $\left.\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = \left.\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right|_{x=1} = 0$

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する. ステップ · サイズを $h = \dfrac{1}{n-1}$,
$x_i := (i-1)h \quad (i = 1, \cdots, n)$, とし, u_i を $u(x_i)$ の近似とし, $f_i := f(x_i)$ とする.
また, $\alpha_{\pm} := 1 \pm \dfrac{\beta h}{2}$ とおく. 従って, $\alpha_+ + \alpha_- = 2$ である.

3.6.1 周期境界条件

この場合は, 境界条件を $u_0 = u_n$, $u_{n+1} = u_1$ で近似すると, 離散化で得られる連立一次方程式 $A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$ は

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & \alpha_+ & & & \alpha_- \\ \alpha_- & -2 & \alpha_+ & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \alpha_- & -2 & \alpha_+ \\ \alpha_+ & & & \alpha_- & -2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix} \tag{3.19}$$

である.

このとき, 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, 行列 A は特異である. 従って, 次元定理より $\dim(\ker A) = 1$ で, $\boldsymbol{e} = (1, 1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}$ とおくと, $A\boldsymbol{e} = \mathbf{0}$ より, $\ker A = \langle \boldsymbol{e} \rangle$ である.

一方, $A=(a_{ij})$ として, $(A\boldsymbol{u},\boldsymbol{e})=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}u_j=\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n}a_{ij}\right)u_j=0\quad {}^{\forall}\boldsymbol{u}\in\mathbf{R}^n$ だから, $\boldsymbol{e}\perp R(A)$ となり, $\boldsymbol{e}\in R(A)^{\perp}$ である. さらに, $\dim\,R(A)^{\perp}=\dim\ker A=1$ より $R(A)^{\perp}=\ker A=\langle\boldsymbol{e}\rangle$ を得る.

また,

$$M(A):=\frac{A+A^{\mathrm{T}}}{2}=\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 1\\ 1 & -2 & 1 & & \text{\huge 0}\\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \text{\huge 0} & & 1 & -2 & 1\\ 1 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

だから, Gerschgorin の定理より, $M(A)$ の固有値は閉区間 $[-4,0]$ 内にある. 従って, $M(A)$ は半負定値である. また, $\mathrm{rank}\,M(A)=\mathrm{rank}A=n-1$ である.

よって, 定理 3.16 より, この周期境界条件の場合に生じる連立一次方程式 (3.19) に CR 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 $\mathbf{0}$ に収束する.

さらに, $\boldsymbol{f}\in R(A)=(\ker A)^{\perp}\iff\boldsymbol{f}\perp\ker A=\langle\boldsymbol{e}\rangle\iff(\boldsymbol{f},\boldsymbol{e})=\sum_{i=1}^{n}f_i=0$ より, $\sum_{i=1}^{n}f_i=0$ であれば $\boldsymbol{f}\in R(A)$ である. この場合, 定理 3.18 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.

3.6.2 Neumann 境界条件

この場合, 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 $A\boldsymbol{u}=\boldsymbol{f}$ は

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \text{\huge 0}\\ \alpha_- & -2 & \alpha_+ & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \alpha_- & -2 & \alpha_+\\ \text{\huge 0} & & & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1\\ u_2\\ \vdots\\ u_{n-1}\\ u_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0\\ f_2\\ \vdots\\ f_{n-1}\\ 0 \end{bmatrix}$$

である.

このとき, 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, 行列 A は特異である. 従って, $\dim(\ker A)=1$ で, $A\boldsymbol{e}=\mathbf{0}$ より, $\ker A=\langle\boldsymbol{e}\rangle$ 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, $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}A=\mathbf{0}^{\mathrm{T}}$ より,

$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{y}, A\boldsymbol{x}) = 0 \quad {}^{\forall}\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$. 従って, $\boldsymbol{y} \in R(A)^{\perp}$ である.
ところで, $\dim R(A)^{\perp} = \ker A = 1$ より, $R(A)^{\perp} = \langle \boldsymbol{y} \rangle$ 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. なぜならば, $\ker A = \langle \boldsymbol{e} \rangle$, $R(A) = \langle \boldsymbol{y} \rangle^{\perp}$ より, $\ker A \oplus R(A) = \mathbf{R}^n \Longleftrightarrow \langle \boldsymbol{e} \rangle \subset R(A)$ でない $\Longleftrightarrow \boldsymbol{e} \perp \boldsymbol{y}$でない $\Longleftrightarrow (\boldsymbol{e}, \boldsymbol{y}) \neq 0$ だからである. というのは, $\alpha_{\pm} = 1 \pm \dfrac{bh}{2} > 0$ より
$(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{y}) = 1 + \dfrac{1}{\alpha_-} + \dfrac{\alpha_+}{\alpha_-^2} + \cdots + \dfrac{\alpha_+^{n-3}}{\alpha_-^{n-2}} + \dfrac{\alpha_+^{n-2}}{\alpha_-^{n-2}} > 1$ だからである.

ここで, $\boldsymbol{f} \perp \boldsymbol{y} \Longleftrightarrow (\boldsymbol{f}, \boldsymbol{y}) = \dfrac{1}{\alpha_-} f_2 + \dfrac{\alpha_+}{\alpha_-^2} f_3 + \cdots + \dfrac{\alpha_+^{i-2}}{\alpha_-^{i-1}} f_i + \cdots + \dfrac{\alpha_+^{n-3}}{\alpha_-^{n-2}} f_{n-1} = 0$ を充たすように $f_2, \cdots, f_{n-1}$ を選べば, $\boldsymbol{f} \in R(A)$ となる.

しかし, CR 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 $\mathbf{0}$ に収束するための必要十分条件 (定理 3.26 の条件 C3) である $M(C)$ の定値性を一般の場合に判定するのは簡単ではない.

例えば, $n = 3$ の場合は

$$A = \begin{bmatrix} -4 & 4 & 0 \\ 4-\beta & -8 & 4+\beta \\ 0 & 4 & -4 \end{bmatrix}$$

となる. 従って, $\ker A = \langle \boldsymbol{e} \rangle$ より $\boldsymbol{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)^{\mathrm{T}}$, それに直交する $(\ker A)^{\perp}$ の正規直交基底として例えば $\boldsymbol{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}(1,-1,-2)^{\mathrm{T}}$ をとると,

$$U_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} \end{bmatrix}$$

を得る.

また, $R(A)^{\perp} = \langle \boldsymbol{y} \rangle$ より, $\boldsymbol{q}_3 = c_3\,(\,4-\beta,\,4,\,4+\beta\,)^{\mathrm{T}}$, それに直交する $R(A)$ の正規直交基底として例えば
$\boldsymbol{q}_1 = c_1\,(\,-4,\,4-\beta,\,0\,)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{q}_2 = c_2\,(\,(4-\beta)(4+\beta),\,4(4+\beta),\,-\beta^2+8\beta-32\,)^{\mathrm{T}}$
をとる. ただし, $c_i > 0$ $(i = 1,2,3)$ は正規化のための定数である.

そこで, $Q_1 = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2]$, $A'_{11} = Q_1^{\mathrm{T}} A U_1$, $B = U_1^{\mathrm{T}} Q_1$, $C = A'_{11} B$ とおき, $M(C) = (m_{ij})$ を求めると, 任意の実数 β に対して $m_{11} < 0$, $\det M(C) > 0$ となり, $M(C)$ は負定値であることが示せる.

4 まとめ

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ または最小二乗問題 $\min\limits_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$ に対して,
$R(A)^{\perp} = \ker A$ の場合は, 共役残差法 (CR 法) を $R(A)$ と $\ker A$ の成分に分離でき, その

ときCR法が任意の右辺及び初期解に対して破綻なく収束するための必要十分条件は, A の対称部 $M(A)$ が半定値かつ $\mathrm{rank}\, M(A) = \mathrm{rank} A$ であることを示し, そのとき最小二乗解が得られることを示した. さらに $\boldsymbol{x}_0 \in R(A)$ のときは近似解はノルム最小の最小二乗解 (擬逆解) に収束する.

また, $R(A) \oplus \ker A = \mathbf{R}^n$ かつ $\boldsymbol{b} \in R(A)$ のときに, CR法が任意の初期近似解に対して破綻することなく最小二乗解に収束するための必要十分条件を導いた.

最後に, 上記の二つの場合に相当する二点境界値問題の差分近似の例を取り上げた.

謝辞　有益な示唆をいただいた東京大学 大学院工学系研究科の谷田川英治氏および張 紹良先生, 文部科学省 統計数理研究所の田辺國士先生に感謝いたします.

本研究は文部省科学省 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] Biro, O., Preis, K. and Richter, K. R., On the use of the magnetic vector potential in the nodal and edge finite element analysis of 3-D magnetostatic problems, *IEEE Trans. Magn.*, Vol. 32, No. 3 (1996), pp. 651–654.

[3] Brown, P. and Walker, H. F., GMRES on (Nearly) Singular Systems, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 18, No. 1 (1997), pp. 37–51.

[4] Dayar, T. and Stewart, W.J., Comparison of partitioning techniques for two-level iterative solvers on large, sparse Markov chains, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 21, No. 5 (2000), pp. 1691–1705.

[5] Dax, A., The convergence of linear stationary iterative processes for solving singular unstructured systems of linear equations, *SIAM Rev.*, Vol. 32, No. 4 (1990), pp. 611–635.

[6] Eiermann, M., Marek, I. and Niethammer, W., On the solution of singular linear systems of algebraic equations by semiiterative methods, *Num. Math.*, Vol. 53 (1988), pp. 265–283.

[7] 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.

[8] Fletcher, R., Conjugate gradient methods for indefinite systems, in Watson, G. ed., *Numerical Analysis Dundee 1975*, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 506, Springer-Verlag, Berlin, 1976, pp. 73–89.

[9] Freund, R.W., A transpose-free quasi-minimal residual algorithm for non-Hermitian linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 14 (1993), pp. 425–448.

[10] Freund, R. W. and Hochbruck, M., On the use of two QMR algorithms for solving singular systems and applications in Markov chain modeling, *Num. Lin. Alg. Appl.*, Vol. 1, No. 4 (1994), pp. 403–420.

[11] Freund, R.W. and Nachtigal, N.M., QMR: a quasi-minimal residual method for non-Hermitian linear systems, *Numer. Math.*, Vol. 60 (1991), pp. 315–339.

[12] 速水 謙, 特異な系に対する共役残差法の収束性について, 日本応用数理学会 2000 年度年会 講演予稿集, 2000, pp. 58–59.

[13] Hayami, K., On the behaviour of the conjugate residual method for singular systems, *Proc. of the Fifth China-Japan Joint Seminar on Numerical Mathematics*, Shanghai, 2000, (submitted).

[14] 堀端康善, 特異な非対称行列を係数とする連立一次方程式での各種反復解法の収束特性と流れの数値シミュレーションへの応用, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 8, No. 2 (1998), pp. 287–305.

[15] Igarashi, H., On the reconstruction of magnetic source in cylindrical permanent magnets, in Tanaka, M. and Dulikravich, G.S. eds., *Inverse Problems in Engineering Mechanics II*, Elsevier, 2000, pp. 467–476.

[16] Kaasschieter, E.F., Preconditioned conjugate gradients for solving singular systems, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 24 (1988), pp. 265–275.

[17] Kammerer, W.J. and Nashed, M.Z., On the convergence of the conjugate gradient method for singular linear operator equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 9, No. 1 (1972), pp. 165–181.

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

[19] Ren, Z., Influence of the R.H.S. on the convergence behaviour of the curl-curl equation, *IEEE Trans. Magn.*, Vol. 32, No. 3 (1996), pp. 655–658.

[20] 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.

[21] Sonneveld, P., CGS: a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 10 (1989), pp. 36–52.

[22] 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.

[23] Tanabe, K., Characterization of linear stationary processes for solving singular system of linear equations, *Numer. Math*, Vol. 22 (1974), pp. 349–359.

[24] Tanabe, K., The conjugate gradient method for computing all the extremal stationary probability vectors of a stochastic matrix, *Ann. Inst. Statist. Math.*, Vol. 37, Part B (1985), pp. 173–187.

[25] van der Vorst, H. A., Bi-CGSTAB: A more smoothly converging variant of CG-S for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol. 13 (1992), pp. 631–644.

[26] Vinsome, P.K.W., Orthomin, an iterative method for solving sparse sets of simultaneous linear equations, in *Proc. Fourth Symp. on Reservoir Simulation*, Soc. of Petroleum Engineers of AIME, 1976, pp. 149–159.

[27] Washio, T. and Doi, S., A solution of Neumann problem on curvilinear coordinate systems, *Matrix Analysis and Parallel Computing*, Proc. of PCG'94, March, 1994, Keio Univ., 1994, pp. 75–87.

[28] Wei, Y. and Wu, H., Convergence properties of Krylov subspace methods for singular linear systems with arbitrary index, *J. Comp. Appl. Maths.*, Vol. 114 (2000), pp. 305–318.

[29] Zhang, S.-L., Oyanagi, Y. and Sugihara, M., Necessary and sufficient conditions for the convergence of Orthomin(k) on inconsistent linear systems, *Numer. Math.*, Vol.87 (2000), pp. 391–405.

速水 謙　〒101-8430 東京都 千代田区 一ツ橋 2-1-2　hayami@nii.ac.jp
1981 年 東京大学 大学院工学系研究科 修士課程修了. Ph.D., 工学博士. 日本電気 (株) 研究所, 東京大学 大学院工学系研究科 助教授を経て, 現在 国立情報学研究所 情報学基礎研究系 情報数理研究部門 教授. 数値解析 (数値線型代数, 境界要素法, 逆問題 等) の研究に従事. 日本応用数理学会, 情報処理学会, SIAM 等会員.