線形方程式・固有値問題に対するクリロフ部分空間法について

今倉　暁，相原　研輔

本稿では線形方程式および固有値問題の各種の行列計算アルゴリズムに着目する．線形方程式と固有値問題は行列計算の最も基本となる問題であり，関数補間や微分方程式，機械学習などさまざまな応用があるだけでなく，さまざまな行列計算アルゴリズムの内部問題としても現れる．どちらの問題についても行列サイズが小さい場合は手計算で解くことができるものの，行列サイズが大きい問題を効率的に計算するアルゴリズムについては現在でも活発に研究が進められている．本稿では基本的な行列計算アルゴリズムの分類について紹介し，特に共通の技術であるクリロフ部分空間を用いた射影法について解説する．

キーワード：線形方程式，固有値問題，クリロフ部分空間，射影法

1. はじめに

本稿では，以下の標準的な線形方程式および固有値問題に対する各種の行列計算アルゴリズムに着目する．

線形方程式　行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ および右辺ベクトル $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ に対し，

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

を満たす解ベクトル $\boldsymbol{x}$ を求める問題．なお，本稿では行列 A が正則である場合に限定する．

固有値問題　行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対し，

$$A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x} \tag{2}$$

を満たす固有値 $\lambda \in \mathbb{C}$ および非ゼロの固有ベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n \setminus \{\boldsymbol{0}\}$ を求める問題．固有値の重複も含め n 個の固有対 $(\lambda, \boldsymbol{x})$ が存在する．

線形方程式 (1) と固有値問題 (2) は行列計算の最も基本となる問題である．線形方程式は関数補間や微分方程式などさまざまな応用があるだけでなく，固有値問題や最小二乗問題などさまざまな行列計算アルゴリズムの内部問題としても現れる．また，固有値問題は微分方程式や機械学習などさまざまな応用があり，行列関数計算などの内部問題としても現れる．どちらの問題についても行列サイズ n が非常に小さい場合は手計算で簡単に解くことができる．一方，行列サイズが大きい問題を効率的に計算するアルゴリズムについては現在でも活発に研究が進められている．

本稿では線形方程式および固有値問題に対する基本的な行列計算アルゴリズムとして直接法・反復法および射影法について紹介する．また，共通の技術であるクリロフ部分空間を用いた射影法について解説する．

2. 行列計算アルゴリズム

行列 A が正則である場合，逆行列 A^{-1} が存在し，線形方程式 (1) の解は $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$ と書くことができる．また，クラメルの公式により線形方程式の解の各要素を直接表現することもできる．一方，行列 A の固有値 λ は n 次の代数方程式である特性方程式 $\det(\lambda I_n - A) = 0$ の解として与えられる．ここで，I_n は n 次単位行列である．

しかしながら，これらの数学的な表現は行列計算アルゴリズムとは直接関係するものではない．逆行列 A^{-1} や特性方程式を陽に計算することは計算量や計算精度の観点から適切ではなく，特に大規模な問題に対してはこれらに代わる有効な計算法が求められる．

基本的な行列計算アルゴリズムの詳細については，たとえば文献 [1–4] を参照されたい．

2.1 直接法と反復法

線形方程式や固有値問題だけでなく最小二乗問題や行列関数計算なども含め，一般に行列計算のアルゴリズムは大きく分けると直接法と反復法に分けられる．

- **直接法**：有限回の四則演算により解を直接計算する方法．
- **反復法**：解に収束する近似解列を逐次的に生成する方法．残差ノルムなどの指標を用いて，十分な

いまくら　あきら
筑波大学システム情報系
〒 305–8577 茨城県つくば市天王台 1–1–1
imakura@cs.tsukuba.ac.jp
あいはら　けんすけ
東京都市大学情報工学部
〒 158–8557 東京都世田谷区玉堤 1–28–1
aiharak@tcu.ac.jp

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

精度が得られた場合に反復を停止し近似解を得る．

直接法は一般に行列分解に基づくことが多く，計算誤差を無視すると問題の性質に依存せず安定的に解を得ることができ，あらかじめ計算時間を見積もることもできる．これに対して反復法は，計算誤差を無視したとしても必ずしも厳密解が得られるわけではなく，要求精度に対する必要な反復回数は問題の性質に強く依存する．一方で，反復法のアルゴリズムは行列ベクトル積を基盤とすることが多く，行列の疎性を利用することで計算量および記憶容量を大きく削減することができる．

2.2 射影法

代表的な反復法として，近似解をある部分空間内で定める射影法が知られている．射影法は部分空間を逐次的に拡大もしくは更新することで近似解の更新を行う手法である．射影法ではどのような部分空間を用いるかが重要であり，後述するクリロフ部分空間が代表的な部分空間として知られている．

2.3 線形方程式の行列計算アルゴリズムの分類

線形方程式 (1) に対する行列計算アルゴリズムも上述のように直接法と反復法に分けることができる．

線形方程式に対する代表的な直接法はLU 分解に基づく手法であり，係数行列 A が一般の密行列である場合，計算量は $\mathcal{O}(n^3)$ である．なお，係数行列がトエプリッツ行列やヴァンデルモンド行列など特殊な性質をもつ場合は，計算量の少ない高速な解法が知られている．また，行列の疎性を活かし計算量および記憶容量を削減する疎行列向けの LU 分解法についても開発が進められている．

反復法としては，ヤコビ法やガウス・ザイデル法，逐次加速緩和 (SOR) 法に代表される定常反復法，および非定常反復法であるクリロフ部分空間を用いた射影法「クリロフ部分空間法」が知られている．

- **定常反復法**：近似解の更新についての写像が定常 $\boldsymbol{x}_k = f(\boldsymbol{x}_{k-1})$ である解法．
- **非定常反復法**：近似解の更新についての写像が非定常 $\boldsymbol{x}_k = f_{k-1}(\boldsymbol{x}_{k-1})$ である解法．

2.4 固有値問題の行列計算アルゴリズムの分類

固有値問題に対する行列計算アルゴリズムは，相似変換に基づく手法と射影法に分けられる．

- **相似変換に基づく手法**：相似変換を利用し行列を固有値計算が容易な対角行列や三角行列に変換する方法．
- **射影法**：対象とする固有ベクトルに応じた部分空間を生成し，その中で近似固有対を計算する方法．

QR 法に代表される相似変換に基づく手法は，一般に直交行列 P による相似変換 $P^{-1}AP$ を用いて係数行列 A の対角化もしくはシューア標準形への変換を行う．一般の行列に対して対角行列や三角行列への相似変換は有限回では実現できないことから，固有値問題に対しては厳密な意味での直接法は存在しない．しかしながら，相似変換の回数は（適切なシフト戦略を用いることで）おおむね行列サイズに依存するため，相似変換に基づく手法は便宜上「直接法」と呼ばれることがある．一般的に，直交行列に基づく相似変換が用いられ，高精度で固有対を計算することができる．一方で，行列を直接変換するため行列の疎性を利用することが難しい．また，部分固有対を求める場合でも計算量の削減があまりできないため，一般に密行列のすべての固有値（もしくは固有対）を計算する場合に用いられる．

べき乗法や後述するアーノルディ法に代表される射影法は，線形方程式に対する反復法と同様に一般にアルゴリズムは行列ベクトル積を基盤とすることが多く，行列の疎性を利用することで計算量および記憶容量の削減が可能である．基本的にはすべての固有対の計算はできないため，部分固有値（もしくは固有対）を計算する場合に用いられる．

3. クリロフ部分空間の概要

本節では，線形方程式や固有値問題をはじめ多くの行列計算で用いられる代表的な部分空間であるクリロフ部分空間の概要について示す．

3.1 クリロフ部分空間の定義

ベクトル $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^n$ に対し，正方行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を順に作用することで得られるベクトル列

$$\boldsymbol{u}, A\boldsymbol{u}, A^2\boldsymbol{u}, \ldots$$

をクリロフ列と呼び，クリロフ列で張られる部分空間

$$\mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{u}) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{u}, A\boldsymbol{u}, A^2\boldsymbol{u}, \ldots, A^{k-1}\boldsymbol{u}\}$$

を k 次のクリロフ部分空間と呼ぶ．

クリロフ部分空間の重要な性質として，以下が知られている．

性質 1 クリロフ部分空間が拡大しなくなった場合，線形方程式の解がその空間に含まれる．すなわち，$\mathcal{K}_d(A, \boldsymbol{u}) = \mathcal{K}_{d+1}(A, \boldsymbol{u})$ のとき $A^{-1}\boldsymbol{u} \in \mathcal{K}_d(A, \boldsymbol{u})$ が成り立つ．

性質 2 クリロフ列は行列 A の絶対値最大の固有値に対応する固有ベクトルに収束する．（べき乗法の基本原理）

 Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

3.2 基底ベクトルの生成法

上述のクリロフ部分空間の性質 2 から，k 次のクリロフ列の生成において，数学的には一次独立性をもつ場合においても，大きな k に対してはその計算は数値的に不安定となる．このため，クリロフ部分空間の基底として自明なクリロフ列そのものを利用したり，クリロフ列を陽に構築した後で直交化するなどの方法はあまり用いられない．

この問題点を解決するため，空間の拡大と基底の直交化を交互に行う方法が用いられる．具体的には，以下の 3 種類の方法が知られている．

- **アーノルディ過程**：非対称行列に対して，正規直交基底を生成する方法．
- **ランチョス過程**：対称行列に対して，効率的に正規直交基底を生成する方法．
- **非対称ランチョス過程**：非対称行列に対して，効率的に双直交基底を生成する方法．

3.2.1 アーノルディ過程

アーノルディ過程は，非対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対して，クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_k(A,\boldsymbol{u})$ の正規直交基底 $V_k=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\ldots,\boldsymbol{v}_k]\in\mathbb{R}^{n\times k}, V_k^{\mathsf{T}}V_k=I_k$,

$$\mathcal{K}_k(A,\boldsymbol{u})=\mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\ldots,\boldsymbol{v}_k\}$$

をグラム・シュミットの直交化法に基づき逐次的に生成する手法である．前述のとおりクリロフ列をあらかじめ計算することは数値的に不安定であるため，空間の拡大と基底の直交化を交互に行う．

まず，クリロフ列の第 1 ベクトルである $\boldsymbol{u}$ を 2 ノルムで正規化したベクトルを $\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{u}/\|\boldsymbol{u}\|_2$ と置く．このとき，当然，

$$\mathcal{K}_1(A,\boldsymbol{u})=\mathrm{span}\{\boldsymbol{u}\}=\mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_1\}$$

を満たす．ここで，

$$\mathcal{K}_2(A,\boldsymbol{u})=\mathrm{span}\{\boldsymbol{u},A\boldsymbol{u}\}=\mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_1,A\boldsymbol{v}_1\}$$

の関係に着目し，クリロフ列の第 2 ベクトルとして $A\boldsymbol{u}$ ではなく $A\boldsymbol{v}_1$ を用い，グラム・シュミットの直交化を適用する．すなわち，

$$\widetilde{\boldsymbol{v}}_2=A\boldsymbol{v}_1-h_{11}\boldsymbol{v}_1,\quad h_{11}=\boldsymbol{v}_1^{\mathsf{T}}A\boldsymbol{v}_1$$

と置き，

$$\boldsymbol{v}_2=\frac{\widetilde{\boldsymbol{v}}_2}{h_{21}},\quad h_{21}=\|\widetilde{\boldsymbol{v}}_2\|_2$$

により，ベクトル $\boldsymbol{v}_2$ を得る．このとき，$\boldsymbol{v}_2^{\mathsf{T}}\boldsymbol{v}_1=0$ であり，以下を満たす．

$$\mathcal{K}_2(A,\boldsymbol{u})=\mathrm{span}\{\boldsymbol{u},A\boldsymbol{u}\}=\mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2\}.$$

同様に，クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_j(A,\boldsymbol{u})$ の正規直交基底 $V_j=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\ldots,\boldsymbol{v}_j]$ が得られたとする．このとき，

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_{j+1}(A,\boldsymbol{u})&=\mathrm{span}\{\boldsymbol{u},A\boldsymbol{u},\ldots,A^j\boldsymbol{u}\}\\&=\mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\ldots,\boldsymbol{v}_j,A\boldsymbol{v}_j\}\end{aligned}$$

の関係に着目し，クリロフ列の第 $j+1$ ベクトルとして $A\boldsymbol{v}_j$ を構築し，グラム・シュミットの直交化を適用する．すなわち，$\boldsymbol{v}_{j+1}$ は

$$\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1}=A\boldsymbol{v}_j-\sum_{i=1}^{j}h_{ij}\boldsymbol{v}_i,\quad h_{ij}=\boldsymbol{v}_i^{\mathsf{T}}A\boldsymbol{v}_j$$

と置くことで，

$$\boldsymbol{v}_{j+1}=\frac{\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1}}{h_{j+1,j}},\quad h_{j+1,j}=\|\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1}\|_2 \tag{3}$$

と計算される．これを $j=1,2,\ldots,k-1$ と繰り返すことで，クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_k(A,\boldsymbol{u})$ の正規直交基底 V_k が得られる．なお，上記は古典的グラム・シュミットの直交化法を用いた説明であるが，実際は精度の面から修正グラム・シュミットの直交化法を用いることが一般的である．

ここで，式 (3) は

$$A\boldsymbol{v}_j=\sum_{i=1}^{j+1}h_{ij}\boldsymbol{v}_i$$

と書くことができ，ヘッセンベルグ行列 $\widetilde{H}_k\in\mathbb{R}^{(k+1)\times k}$ および $H_k\in\mathbb{R}^{k\times k}$ を

$$\widetilde{H}_k=\begin{bmatrix}h_{11}&h_{12}&\cdots&h_{1k}\\h_{21}&h_{22}&\cdots&h_{2k}\\&\ddots&\ddots&\vdots\\&&h_{k,k-1}&h_{kk}\\&&&h_{k+1,k}\end{bmatrix},$$

$$H_k=\begin{bmatrix}h_{11}&h_{12}&\cdots&h_{1k}\\h_{21}&h_{22}&\cdots&h_{2k}\\&\ddots&\ddots&\vdots\\&&h_{k,k-1}&h_{kk}\end{bmatrix}$$

と置くと，アーノルディ過程の行列表現として，

$$\begin{cases}AV_k=V_{k+1}\widetilde{H}_k,\\V_k^{\mathsf{T}}AV_k=H_k,\end{cases} \tag{4}$$

が得られる．

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

3.2.2 ランチョス過程

ランチョス過程は対称行列向けにアーノルディ過程の計算を効率化するものである．アーノルディ過程の行列表現 (4) に着目すると，行列 A が対称であるとき，ヘッセンベルグ行列 $\widetilde{H}_k, H_k$ が対称三重対角行列となる．ここで，$\alpha_j = h_{jj}$ および $\beta_j = h_{j+1,j} = h_{j,j+1}$ と置くと，ベクトル $\boldsymbol{v}_{j+1}$ の計算 (3) は

$$\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1} = A\boldsymbol{v}_j - \beta_{j-1}\boldsymbol{v}_{j-1} - \alpha_j\boldsymbol{v}_j, \quad \alpha_j = \boldsymbol{v}_j^{\mathsf{T}} A\boldsymbol{v}_j$$

および

$$\boldsymbol{v}_{j+1} = \frac{\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1}}{\beta_j}, \quad \beta_j = \|\widetilde{\boldsymbol{v}}_{j+1}\|_2 \tag{5}$$

と簡略化される．ここで，三重対角行列 $\widetilde{T}_k \in \mathbb{R}^{(k+1)\times k}$ および $T_k \in \mathbb{R}^{k\times k}$ を

$$\widetilde{T}_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k \\ & & & \beta_k \end{bmatrix},$$

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}$$

と置くと，ランチョス過程の行列表現として，

$$\begin{cases} AV_k = V_{k+1}\widetilde{T}_k, \\ V_k^{\mathsf{T}} AV_k = T_k, \end{cases} \tag{6}$$

が得られる．

3.2.3 非対称ランチョス過程

非対称行列に対しては式 (3) のように長い漸化式で直交化を行うのに対し，対称行列に対しては式 (5) のように短い漸化式で直交化が可能である．短い漸化式を用いることでランチョス過程は計算コストを大幅に削減できる．

一方，非対称行列に対しても，行列 A^{T} で生成されるクリロフ部分空間

$$\mathcal{K}_k(A^{\mathsf{T}}, \boldsymbol{u}) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{u}, A^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}, \ldots, (A^{\mathsf{T}})^{k-1}\boldsymbol{u}\}$$

の基底 $W_k = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \ldots, \boldsymbol{w}_k]$ と双直交 $W_k^{\mathsf{T}} V_k = I_k$ となるような基底ベクトルを考えると，短い漸化式で計算可能となる．詳細は割愛するが，ランチョス過程と同様に，三重対角行列を用いた行列表現が与えられる．

4. 線形方程式に対するクリロフ部分空間法

線形方程式 (1) に対するクリロフ部分空間法は，クリロフ部分空間に基づく射影法として定義される．初期近似解を $\boldsymbol{x}_0$，対応する初期残差を $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$ と置く．ここで，

$$\boldsymbol{x}^* = A^{-1}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{x}_0 + A^{-1}\boldsymbol{r}_0$$

の関係から，各 k 反復目の近似解 $\boldsymbol{x}_k$ を

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{z}_k, \quad \boldsymbol{z}_k \in \mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{r}_0)$$

のように k 次のクリロフ部分空間を用いて定めると，上述のクリロフ部分空間の性質 1 により，理論上高々 d ($\leq n$) 反復で $\boldsymbol{x}^* = A^{-1}\boldsymbol{b}$ に収束する近似解列を構築できる．また，実用上の観点では，係数行列 A と初期残差 $\boldsymbol{r}_0$ の関係によっては，より少ない反復回数で高精度な近似解が得られる場合も多い．このとき，対応する残差 $\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k$ は

$$\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{r}_0 - A\boldsymbol{z}_k \in \mathcal{K}_{k+1}(A, \boldsymbol{r}_0)$$

である．

k 次のクリロフ部分空間 $\mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{r}_0)$ の基底 $V_k = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_k]$ に対して，$\boldsymbol{y}_k \in \mathbb{R}^k$ を用いると，

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + V_k\boldsymbol{y}_k, \quad \boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{r}_0 - AV_k\boldsymbol{y}_k$$

と書くことができ，ベクトル $\boldsymbol{y}_k$ を具体的に定めることで近似解 $\boldsymbol{x}_k$ が定まる．ベクトル $\boldsymbol{y}_k$ の設定法および漸化式として近似解ベクトル $\boldsymbol{x}_k$ と残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k$ を具体的にどのように構築するかによって，さまざまなクリロフ部分空間法が提案されている．

線形方程式に対するクリロフ部分空間法の詳細については，たとえば文献 [3, 5–8] を参照されたい．

4.1 基盤解法

ベクトル $\boldsymbol{y}_k$ の設定には，ある k 次元部分空間 $\mathcal{L}_k$ を用いて残差に対する直交条件

$$\boldsymbol{r}_k \perp \mathcal{L}_k$$

を課す方法が用いられる．この条件をペトロフ・ガレルキン条件と呼ぶ．特に，$\mathcal{L}_k = \mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{r}_0)$ とする方法

$$\boldsymbol{r}_k \perp \mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{r}_0) \tag{7}$$

をリッツ・ガレルキン条件と呼ぶ．また，他の方法として最小残差条件

$$\min \|\boldsymbol{r}_k\|_2 \tag{8}$$

 Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

表 1　線形方程式に対するクリロフ部分空間法の基盤解法

解法	行列	基底生成法	解を定めるための条件
共役勾配 (CG) 法	正定値対称	ランチョス過程	リッツ・ガレルキン条件 (7)
共役残差 (CR) 法	対称	ランチョス過程	ペトロフ・ガレルキン条件 (9)
最小残差 (MINRES) 法	対称	ランチョス過程	最小残差条件 (8)
完全直交化法 (FOM)	非対称	アーノルディ過程	リッツ・ガレルキン条件 (7)
一般化共役残差 (GCR) 法	非対称	アーノルディ過程	ペトロフ・ガレルキン条件 (9)
一般化最小残差 (GMRES) 法	非対称	アーノルディ過程	最小残差条件 (8)
双共役勾配 (BiCG) 法	非対称	非対称ランチョス過程	ペトロフ・ガレルキン条件 (10)
双共役残差 (BiCR) 法	非対称	非対称ランチョス過程	ペトロフ・ガレルキン条件 (11)
疑似最小残差 (QMR) 法	非対称	非対称ランチョス過程	疑似最小残差条件

が考えられる．なお，最小残差条件は，ペトロフ・ガレルキン条件の特別な場合

$$\boldsymbol{r}_k \perp A\mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{r}_0) \tag{9}$$

と等価である．

なお，短い漸化式を基盤とする非対称行列向けの解法を設計する場合，上記のリッツ・ガレルキン条件や最小残差条件を満たす解法は設計できないことが知られている．このため，非対称ランチョス過程を用いて式 (7) や式 (9) の代わりに，それぞれ，

$$\boldsymbol{r}_k \perp \mathcal{K}_k(A^{\mathsf{T}}, \boldsymbol{r}_0), \tag{10}$$
$$\boldsymbol{r}_k \perp A^{\mathsf{T}}\mathcal{K}_k(A^{\mathsf{T}}, \boldsymbol{r}_0) \tag{11}$$

を課す．また，最小残差条件 (8) の代わりに，残差ベクトルではなく「疑似的な」残差ベクトルのノルムを最小化する「疑似最小残差条件」も用いられる．

これらのベクトル $\boldsymbol{y}_k$ を定めるための条件とクリロフ部分空間の直交基底の生成法を組み合わせることにより，具体的なクリロフ部分空間法が定義される．基盤となるクリロフ部分空間法の概要を表 1 に示す．

以下では代表的な解法として，共役勾配 (CG, Conjugate Gradient) 法および一般化最小残差 (GMRES, Generalized Minimal RESidual) 法の概要について示す．ここで，$\beta = \|\boldsymbol{r}_0\|_2, \boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{r}_0/\beta, \boldsymbol{e}_1^{(k)} = [1, 0, \ldots, 0]^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^k$ である．

4.1.1　共役勾配 (CG) 法

共役勾配法は正定値対称行列に対して，リッツ・ガレルキン条件 (7) を課す解法である．このとき，ベクトル $\boldsymbol{y}_k$ は，ランチョス過程の行列表現に基づき，以下のように表現される．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_k \perp \mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{r}_0) \quad &\Leftrightarrow \quad V_k^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{r}_0 - AV_k\boldsymbol{y}_k) = \boldsymbol{0} \\ &\Leftrightarrow \quad T_k\boldsymbol{y}_k = \beta\boldsymbol{e}_1^{(k)}. \end{aligned}$$

ここで，行列 T_k が反復ごとに逐次的に拡大される対称三重対角行列である点に着目し，T_k の（修正）コレスキー分解に基づき，近似解 $\boldsymbol{x}_k$ および対応する残差 $\boldsymbol{r}_k$ の漸化式が導出される．

4.1.2　一般化最小残差 (GMRES) 法

GMRES 法は，最小残差条件 (8) を課す解法である．このとき，ベクトル $\boldsymbol{y}_k$ は，アーノルディ過程の行列表現に基づき，以下のように表現される．

$$\begin{aligned} \min \|\boldsymbol{r}_k\|_2 &= \min \|\boldsymbol{r}_0 - AV_k\boldsymbol{y}_k\|_2 \\ &= \min \|V_{k+1}(\beta\boldsymbol{e}_1^{(k+1)} - \widetilde{H}_k\boldsymbol{y}_k)\|_2 \\ &= \min \|\widetilde{H}_k\boldsymbol{y}_k - \beta\boldsymbol{e}_1^{(k+1)}\|_2. \end{aligned}$$

ここで，行列 $\widetilde{H}_k$ が反復ごとに逐次的に拡大されるヘッセンベルク行列である点に着目し，ギブンス回転などに基づく QR 分解を利用することで，ベクトル $\boldsymbol{y}_k$ が効率的に計算される．

4.2　発展的解法

対称行列に対しては，ランチョス過程に基づく（漸化式の項数が反復回数に依存しない）短い漸化式をもち，リッツ・ガレルキン条件 (7) や最小残差条件 (8), (9) を満たす理想的な解法を構築できる．このため，対称行列に対しては，表 1 の基盤解法が現在でも主要な解法として用いられている．一方で，非対称行列に対しては，アーノルディ過程に基づく（漸化式の項数が反復回数に伴って増加する）長い漸化式を利用するか，非対称ランチョス過程を用いる場合は，リッツ・ガレルキン条件 (7) や最小残差条件 (8), (9) は適用できないため，式 (10), (11) のような少し異なる条件が課され，必ずしも理想的な解法とは言えない．このため，特に非対称行列向けのクリロフ部分空間法はこれらの基盤解法を元にさまざまな改良が行われている．

アーノルディ過程に基づく解法は収束性が非常に高く数値的にも安定ではあるものの，反復当たりの計算量

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

が反復回数に伴って増大する．このため，一定の反復回数で反復を一度停止し再度解法を適用するリスタートを用いることが一般的である．しかしながら，リスタートは収束性を悪化させるため，リスタート時の収束性悪化を低減させる研究が行われている．たとえば，デフレーションやルックバック戦略などが知られている．

非対称ランチョス過程に基づく解法は数値的に不安定であることが多く，収束性改善および収束の安定化に向けた研究が進められている．代表的なものは，安定化多項式を用いる積型解法である．クリロフ部分空間法で得られる残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{r}_0 - A\boldsymbol{z}_k, \boldsymbol{z}_k \in \mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{r}_0)$ は，高々 k 次の多項式 $R_k(z)$ $(R_k(0) = 1)$ を用いて，

$$\boldsymbol{r}_k = R_k(A)\boldsymbol{r}_0$$

と書くことができる[1]．ここで，$R_k(z)$ を残差多項式と呼ぶ．これに対し，新しい多項式 $Q_k(z)$ $(Q_k(0) = 1)$ を用い，

$$\boldsymbol{r}_k = Q_k(A)R_k(A)\boldsymbol{r}_0$$

とすることで収束性改善および収束の安定化を目指す解法を積型解法と呼ぶ．ここで，$Q_k(z)$ を安定化多項式と呼ぶ．積型解法は多くの問題で収束の安定化を実現し，非対称ランチョス過程で必要となる行列 A^{T} の行列積を不要とする効果もあり，現在広く用いられている．代表的な積型解法として，BiCGSTAB（双共役勾配安定化）法や GPBiCG（一般化積型双共役勾配）法などがある [9]．

5. 固有値問題に対するクリロフ部分空間法

固有値問題 (2) に対する射影法として，k $(\ll n)$ 次元部分空間 $\mathcal{V}$ から，近似固有対 $(\widetilde{\lambda}_i, \widetilde{\boldsymbol{x}}_i)$ $(i = 1, 2, \ldots, k)$ を計算することを考える．列直交行列 $V \in \mathbb{R}^{n\times k}$ $(V^{\mathsf{T}}V = I_k)$ を部分空間 $\mathcal{V}$ の直交基底を並べた行列であるとする．このとき，近似固有ベクトル $\widetilde{\boldsymbol{x}}_i \in \mathcal{V}$ は

$$\widetilde{\boldsymbol{x}}_i = V\boldsymbol{y}_i \quad (i = 1, 2, \ldots, k)$$

と書くことができる．ここで，$\boldsymbol{y}_i \in \mathbb{C}^k$ である．このとき，対応する残差が部分空間と直交するリッツ・ガレルキン条件

$$\boldsymbol{r}_i = A\widetilde{\boldsymbol{x}}_i - \widetilde{\lambda}_i\widetilde{\boldsymbol{x}}_i \perp \mathcal{V} \quad (i = 1, 2, \ldots, k)$$

を課すことで近似固有対を設定すると，

$$V^{\mathsf{T}}\boldsymbol{r}_i = V^{\mathsf{T}}(AV\boldsymbol{y}_i - \widetilde{\lambda}_i V\boldsymbol{y}_i) = \boldsymbol{0}$$

から，$\widetilde{\lambda}_i, \boldsymbol{y}_i$ は k 次元の固有値問題

$$(V^{\mathsf{T}}AV)\boldsymbol{y}_i = \widetilde{\lambda}_i\boldsymbol{y}_i \tag{12}$$

の固有対として得られることがわかる．

この方法をレイリー・リッツの技法と呼び，得られた近似固有値 $\widetilde{\lambda}_i$ および近似固有ベクトル $\widetilde{\boldsymbol{x}} = V\boldsymbol{y}_i$ をそれぞれリッツ値およびリッツベクトルと呼ぶ．部分空間 $\mathcal{V}$ の代表的な候補がクリロフ部分空間である．

固有値問題に対するクリロフ部分空間法の詳細については，たとえば文献 [3, 10–12] を参照されたい．

5.1 基本解法：アーノルディ法

一般の非対称行列の固有値問題に対するレイリー・リッツの技法において，部分空間としてクリロフ部分空間を用い，基底ベクトルの生成にアーノルディ過程を用いる解法をアーノルディ法と呼ぶ．同様に，対称行列に対してランチョス過程を用いた解法をランチョス法と呼ぶ．以下ではアーノルディ法に焦点を当ててアルゴリズムについて解説する．

アーノルディ法では，初期ベクトル $\boldsymbol{u}$ を設定し，クリロフ部分空間 $\mathcal{K}_k(A, \boldsymbol{u})$ を逐次的に拡大しレイリー・リッツの技法に基づき近似固有対を計算する．このとき，各反復における小規模固有値問題 (12) はアーノルディ過程の行列表現 (4) に基づき，

$$H_k\boldsymbol{y}_i = \widetilde{\lambda}_i\boldsymbol{y}_i \tag{13}$$

に変換される．したがって，陽に $V_k^{\mathsf{T}}AV_k$ を計算する必要はない．また，収束判定は残差ノルム $\|\boldsymbol{r}_i\|_2 = \|A\widetilde{\boldsymbol{x}}_i - \widetilde{\lambda}_i\widetilde{\boldsymbol{x}}_i\|_2$ で行う．ここで，各 k 反復目の残差ノルム $\|\boldsymbol{r}_i\|_2$ は，$\boldsymbol{y}_i = [y_1, y_2, \ldots, y_k]^{\mathsf{T}} \in \mathbb{C}^k$ と置くと，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r}_i &= A\widetilde{\boldsymbol{x}}_i - \widetilde{\lambda}_i\widetilde{\boldsymbol{x}}_i \\
&= AV_k\boldsymbol{y}_i - \widetilde{\lambda}_i V_k\boldsymbol{y}_i \\
&= V_{k+1}\left(\widetilde{H}_k - \widetilde{\lambda}_i\begin{bmatrix} I_k \\ \boldsymbol{0}^{\mathsf{T}} \end{bmatrix}\right)\boldsymbol{y}_i \\
&= V_{k+1}\begin{bmatrix} (H_k - \widetilde{\lambda}_i I_k)\boldsymbol{y}_i \\ h_{k+1,k}y_k \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

であり，式 (13) から $H_k\boldsymbol{y}_i - \widetilde{\lambda}_i\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{0}$ であるため，

$$\|\boldsymbol{r}_i\|_2 = |h_{k+1,k}y_k|$$

のように残差ノルムを効率的に計算できる．

アーノルディ法やランチョス法はべき乗法と同様に絶対値最大固有値および対応する固有ベクトルについ

[1] クリロフ部分空間法におけるベクトル $\boldsymbol{y}_k$ の決定と多項式 $R_k(z)$ の決定は等価であり，多項式の観点では残差ノルム $\|\boldsymbol{r}_k\|_2$ を小さくする多項式 $R_k(z)$ の決定法が焦点となる．

 Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

て高い収束性を示すが，それ以外にも最小固有値などについても高い収束性を示し，複数の固有対を同時に計算することが可能である．一方で，内部固有値に対する収束性は必ずしも高くなく，ある値 σ の近傍の固有値および対応する固有ベクトルが必要とされる場合には，固有値問題 (2) と等価な

$$(A-\sigma I_n)^{-1}\boldsymbol{x}=\frac{1}{\lambda-\sigma}\boldsymbol{x}$$

に対するアーノルディ法であるシフト逆アーノルディ法などが用いられる．なお，行列 $(A-\sigma I_n)^{-1}$ を陽に構築するのではなく，各反復において係数行列を $A-\sigma I_n$ とする線形方程式を求解する．

線形方程式に対するアーノルディ過程に基づく解法と同様に，アーノルディ法はクリロフ部分空間の次元数を大きく取ると直交化の計算コストが増大する．このため，一定の次元数 m で空間の拡大を一度停止し，得られた近似固有ベクトルを初期ベクトルとして再びクリロフ部分空間を構築するリスタートが用いられることが一般的である．

5.2 発展的解法

上述のアーノルディ法やランチョス法は，リッツ・ガレルキン条件に基づき近似固有対を計算した．一方で，近似解の精度を残差ノルム $\|\boldsymbol{r}_i\|_2$ で評価する以上，最小残差条件 $\min\|\boldsymbol{r}_i\|_2$ に基づき近似固有対を計算することも考えられる．アーノルディ過程の場合，最小残差条件は，

$$\min\|\boldsymbol{r}_i\|_2=\min\left\|\left(\widetilde{H}_k-\widetilde{\lambda}_i\begin{bmatrix}I_k\\ \boldsymbol{0}^{\mathsf{T}}\end{bmatrix}\right)\boldsymbol{y}_i\right\|_2$$

と書くことができる．したがって，ある近似固有値 $\widetilde{\lambda}_i$ に対し，最小残差条件を満たすベクトル $\boldsymbol{y}_i$ は行列

$$\widetilde{H}_k-\widetilde{\lambda}_i\begin{bmatrix}I_k\\ \boldsymbol{0}^{\mathsf{T}}\end{bmatrix}\in\mathbb{C}^{(k+1)\times k}$$

の最小特異値に対応する右特異ベクトルとして計算できることがわかる．アーノルディ法で得られた近似固有値 $\widetilde{\lambda}_i$ を利用し，固有ベクトルを最小残差条件に基づき修正する方法を修正アーノルディ法と呼ぶ．

上述のとおり，部分空間に基づく固有値計算アルゴリズムにおいて，部分空間の設計法がアルゴリズムの肝であり，線形方程式でも利用されたクリロフ部分空間が有力な部分空間として用いられる．そのほか，構築した部分空間と固有ベクトルの誤差を修正方程式により（近似的に）求解することで部分空間を拡大するヤコビ・デビッドソン法などが知られている．

一方，適当な初期行列 $V\in\mathbb{R}^{n\times k}$ に対し，周回積分

$$\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint_\Gamma(zI_n-A)^{-1}V\mathrm{d}z$$

を用いることで，複素平面上の閉曲線 Γ で囲まれた領域の内部の固有値に対応する部分空間（の基底）が構築可能であることが知られている．この性質に基づく周回積分型の固有値解法である櫻井・杉浦法が特に高い並列性をもつ解法として知られている．

6. まとめ

本稿では線形方程式と固有値問題に焦点を当て，基本的な行列計算アルゴリズムの分類について紹介し，特に共通の技術であるクリロフ部分空間を用いた部分空間射影法について解説した．

本稿では触れなかったが，線形方程式の発展問題であるシフト線形方程式や複数右辺線形方程式，また固有値問題の発展問題である一般化固有値問題や非線形固有値問題についてもさまざまな応用があり，これらの問題に対しての効率的なアルゴリズムの開発も進められている．現在，これらの発展問題に対しても多くのアルゴリズムが提案されているが，本稿で紹介したクリロフ部分空間法を拡張する手法が代表的なものとして知られている．

このように，クリロフ部分空間射影法は，線形方程式や固有値問題およびその発展問題，さらには，最小二乗問題や行列方程式，行列関数計算などでも用いられる行列計算の基盤的なアルゴリズムである．本稿では線形方程式と固有値問題を対象にアルゴリズムを紹介したが，他の行列計算においてもクリロフ部分空間法と同様の技術が用いられており，技術的な汎用性が高い．今後もさらなる発展・展開が期待される．

参考文献

[1] J. W. Demmel, *Applied Numerical Linear Algebra*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
[2] G. H. Golub and C. F. van Loan, *Matrix Computations*, 4th Edition, JHU Press, 2013.
[3] 櫻井鉄也，松尾宇泰，片桐孝洋（編），日本応用数理学会監修，『数値線形代数の数理と HPC（シリーズ応用数理第 6 巻）』，共立出版，2018.
[4] 杉原正顯，室田一雄，『線形計算の数理』，岩波書店，2009.
[5] 藤野清次，阿部邦美，杉原正顯，中嶋徳正，日本計算工学会（編），『線形方程式の反復解法（計算力学レクチャーコース）』，丸善出版，2013.
[6] Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd Editoin, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
[7] T. Sogabe, *Krylov Subspace Methods for Linear Systems*, Springer, 2022.
[8] H. A. van der Vorst, *Iterative Krylov Methods for*

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

Large Linear Systems, Cambridge University Press, 2003.
[9] 相原研輔，“連立一次方程式に対する積型 Bi-CG 法の発展，”応用数理，**30**, pp. 16–23, 2020.
[10] F．シャトラン（伊里正夫，伊里由美訳），『行列の固有値 [新装版] 最新の解法と応用』，丸善出版，2012.
[11] 長谷川秀彦，今村俊幸，山田進，櫻井鉄也，荻田武史，相島健助，木村欣司，中村佳正，日本計算工学会（編），『固有値計算と特異値計算（計算力学レクチャーコース）』，丸善出版，2019.
[12] Y. Saad, *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*, Revised Edition, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2011.

 Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.