CG 法のアルゴリズム

行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ は正定値対称行列であるとする．連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く CG 法 (Conjugate Gradient Method, 共役勾配法) のアルゴリズムは以下のようになる．

Algorithm 1 Conjugate Gradient Method

Input: $A, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}_0$

Output: $\hat{\boldsymbol{x}} \quad where \quad A\hat{\boldsymbol{x}} \approx \boldsymbol{b}$

```
1: r_0 = b − A x_0
2: p_0 = r_0
3: for k = 0, 1, ... do
4:     α_k = (p_k, r_k) / (p_k, A p_k)
5:     x_{k+1} = x_k + α_k p_k
6:     r_{k+1} = r_k − α_k A p_k
7:     β_k = −(r_{k+1}, A p_k) / (p_k, A p_k)
8:     p_{k+1} = r_{k+1} + β_k p_k
9: end for
```

1: $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$

2: $\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0$

3: **for** $k = 0, 1, \ldots$ **do**

4: $\quad \alpha_k = \frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$

5: $\quad \boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$

6: $\quad \boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k$

7: $\quad \beta_k = -\frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$

8: $\quad \boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$

9: **end for**

反復は Step 6. において残差ベクトルの 2 ノルム $||\boldsymbol{r}_{k+1}||_2$ が小さくなったときに終了する．アルゴリズム中で行列 A とベクトル $\boldsymbol{p}_k$ の積 $A\boldsymbol{p}_k$ が複数回現れるが，一度計算したときに変数の代入しておき，何度も行列とベクトルの積を計算することを避けること．

Step 4. は $\alpha_k = \dfrac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$，Step 7. は $\beta_k = \dfrac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}$ としてもよい．