連立一次方程式の数値解法2：共役勾配法．

$$Ax = b$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix},\quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},\quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

A：大規模疎行列（n：巨大，Aの非零成分は少ない）

…実用上よく現れる．

LU分解による解法は不適（LU分解の計算量 $O(n^3)$）

↓

別の解法が必要

（仮定）A：正定値対称行列

$(x, Ax) \geq 0\ (\forall x \in \mathbb{R}^n)$ かつ "$(x, Ax) = 0 \Rightarrow x = 0$", $A^T = A$

ここで，$(x, y) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \quad \left(x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},\ y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \right)$ …内積

連立一次方程式 $Ax = b$ を解くことは，次の二次関数 $f(x)$ の最小化問題と同等である：

$$f(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (b, x).$$

i.e.

$$Ax^* = b \iff f(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x).$$

$$\left(\because\ f(x) = \frac{1}{2}((x - x^*), A(x - x^*)) + \text{const.} \quad \boxtimes \right)$$

〈反復解法〉

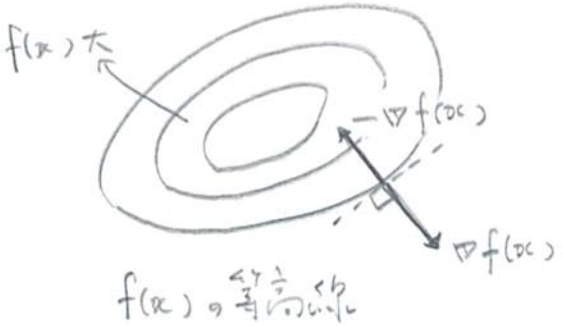
> $x_0 \in \mathbb{R}^n$ を適当にとる；
> $k = 0, 1, 2, \cdots$ に対し
> [探索方向ベクトル p_k を適切に定める；
> $f(\alpha_k) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(x_k + \alpha p_k)$ なる α_k を見つける；
> $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$；

→ $x_k \to x^*$（$Ax = b$ の解）と期待される．

〈最急降下法〉　探索方向ベクトル $\boldsymbol{p}_k$ をどうとるか？

素朴に思いつく方法 … $f(\boldsymbol{x})$ の最急降下方向に $\boldsymbol{p}_k$ をとる.

$$\boldsymbol{p}_k = -\nabla f(\boldsymbol{x}_k)\ , \quad \text{where} \quad \nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \partial f/\partial x_1 \\ \vdots \\ \partial f/\partial x_n \end{bmatrix}$$



いまの場合, $-\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$ … <u>残差ベクトル</u>

算法 〜最急降下法〜

$\boldsymbol{x}_0$ を適当にとる;

$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$;

$k = 0, 1, 2, \cdots$ に対して

$f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} f(\boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{p}_k)$ なる α_k を見つける;

$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$;

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

$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1}$;

いまの場合, $f(\boldsymbol{x})$ は二次関数なので, α_k は厳密にわかる:

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}.$$

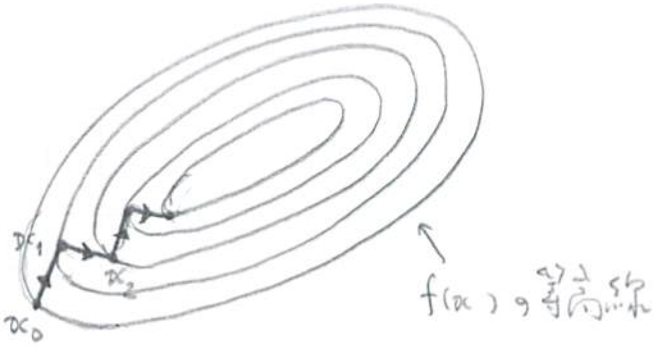
$$\Big(\because\ f(\boldsymbol{x}_k + \alpha \boldsymbol{p}_k) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_k + \alpha\boldsymbol{p}_k, A(\boldsymbol{x}_k + \alpha\boldsymbol{p}_k)) - (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}_k + \alpha\boldsymbol{p}_k)$$

$$= \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)\alpha^2 - (\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{p}_k)\alpha + \text{const.}$$

$$= \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)\alpha^2 - (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)\alpha + \text{const.}$$

$$= \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)\left[\alpha - \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}\right]^2 + \text{const.} \quad \boxtimes \Big)$$

最急降下法の問題点、
…同じ方向の p_k が何度も現れる可能性がある。
そうなると、解を探す空間が拡がらず、
x_k が解 x^* にたどり着けないことがある。



最急降下法の反復解 x_k の振舞い

〈共役方向法〉 最急降下法の問題点を解決したい。

探索方向ベクトル達 $\{p_0, p_1, \cdots, p_{k-1}\}$ が一次独立になるようにすれば、解空間 S_k が確実に拡がって、$x_k \to x^*$ となるだろう。

$$\boxed{(p_k, A p_\ell) = 0 \quad (k \neq \ell)} \quad \text{A-直交性} \quad \text{—(*)}$$

となるように p_k をとる。

共役方向法 …(*) を満たすように p_k をとった反復解法の総称。

(*) が成立 $\longrightarrow$ $\{p_0, p_1, \cdots, p_{k-1}\}$ は一次独立となる。
（各自確かめること。）

このとき、次式が成り立つ（変数分離）：

$$\left.\begin{aligned} &f\left(x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} c_j p_j\right) = \sum_{j=0}^{k-1} \psi(c_j p_j) + f(x_0), \\ &\text{where} \quad \psi(y) = \frac{1}{2}(y, Ay) - (r_0, y). \end{aligned}\right\} ☆$$

$$\Big(\because \ f\Big(x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} c_j p_j\Big)$$

$$= \frac{1}{2}\Big(x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} c_j p_j,\ A\Big(x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} c_j p_j\Big)\Big) - \Big(b,\ x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} c_j p_j\Big)$$

[(*) を用いて]

$$= \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{k-1} c_j^2 (p_j, A p_j) - \sum_{j=0}^{k-1} c_j (b - A x_0, p_j) + f(x_0)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{k-1} c_j (p_j, A p_j) - \sum_{j=0}^{k-1} c_j (r_0, p_j) + f(x_0)$$

$$= \sum_{j=0}^{k-1} \varphi(c_j p_j) + f(x_0). \qquad \boxtimes \ \Big)$$

☆ より、

$$f(x_k) = \min_{c \in \mathbb{R}} f(x_{k-1} + c p_{k-1})$$

$$= \min\Big\{ f\Big(x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} c_j p_j\Big) \ \Big|\ c_0, c_1, \dots, c_{k-1} \in \mathbb{R} \Big\}.$$

直線探索の繰り返しで空間 $S_k = \{ x_0 + \sum_{j=0}^{k-1} c_j p_j \}$ 全体での最小化ができる.

とくに $k = n$ (空間の次元) とすれば、$S_n = \mathbb{R}^n$ なので

$$f(x_n) = \min\Big\{ f\Big(x_0 + \sum_{j=0}^{n-1} c_j p_j\Big) \ \Big|\ c_0, c_1, \dots, c_{n-1} \in \mathbb{R} \Big\}$$

$$= \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

$$\therefore \ x_n = x^* .$$

(理論上は) 有限回の反復で真の解 x^* に到達できる.

＜共役勾配法（conjugate gradient method, CG法）＞

では，$(\mathbb{p}_k, A\mathbb{p}_l) = 0 \ (k \neq l)$ なる $\{\mathbb{p}_k\}$ をどうやって見つけるか？

→ 最急降下法の探索方向ベクトル達 $\{\mathbb{r}_k\}$ に "Gram-Schmidt 直交化" を施してつくる．

（$(x, y)_A \equiv (x, Ay)$ を内積と定義したときの Gram-Schmidt 直交化）

$\mathbb{p}_0 = \mathbb{r}_0$,

$k = 0, 1, \cdots (, n-1)$ に対し

$$\mathbb{p}_{k+1} = \mathbb{r}_{k+1} - \sum_{j=0}^{k} \beta_j^{(k)} \mathbb{p}_j \quad \text{where } \beta_j^{(k)} = \frac{(\mathbb{r}_{k+1}, A\mathbb{p}_j)}{(\mathbb{p}_j, A\mathbb{p}_j)}$$

$(j = 0, 1, \cdots, k)$.

↓

実は $\beta_0^{(k)} = \beta_1^{(k)} = \cdots = \beta_{k-1}^{(k)} = 0$ となる．

→ 反復の間，過去の $\mathbb{p}_0, \mathbb{p}_1, \cdots, \mathbb{p}_{k-1}$ を記憶しなくてよい．

∵ (1) まず $(\mathbb{r}_{k+1}, \mathbb{p}_j) = 0 \ (j = 0, 1, \cdots, k)$ が成り立つ．

$$\because\ 0 = \frac{d}{d\alpha} f(x_k + \alpha \mathbb{p}_k)\Big|_{\alpha=\alpha_k} = (\mathbb{p}_k, \nabla f(x_k + \alpha_k \mathbb{p}_k))$$

$$= (\mathbb{p}_k, \nabla f(x_{k+1})) = -(\mathbb{p}_k, \mathbb{r}_k)$$

により，$(\mathbb{r}_{k+1}, \mathbb{p}_k) = 0$ が成り立つ．

次に，$j \leq k-1$ に対し，$\{\mathbb{p}_k\}$ の A-直交性より

$$(\mathbb{r}_{k+1}, \mathbb{p}_j) = \left(\mathbb{r}_{j+1} - \sum_{i=j+1}^{k} \alpha_i A\mathbb{p}_i, \mathbb{p}_j\right)$$

$$= \underbrace{(\mathbb{r}_{j+1}, \mathbb{p}_j)}_{0} - \sum_{i=j+1}^{k} \alpha_i \underbrace{(\mathbb{p}_i, A\mathbb{p}_j)}_{0} = 0.$$

(2) $\alpha_k \neq 0 \ (k = 0, 1, \cdots, n-1)$ と仮定してよい．

$$\left(\because\ \alpha_k = \frac{(\mathbb{r}_k, \mathbb{p}_k)}{(\mathbb{p}_k, A\mathbb{p}_k)}, \quad (\mathbb{r}_k, \mathbb{p}_k) = \left(\mathbb{r}_k, \mathbb{r}_k - \sum_{j=0}^{k-1} \beta_j^{(k-1)} \mathbb{p}_j\right) = \|\mathbb{r}_k\|^2.\right.$$

$\mathbb{r}_k = \mathbb{0}$ ならば $x_k = x^*$ であり，反復終了している．☒ ）

$\beta_j^{(k)}$ の分子 $= (\mathbf{r}_{k+1}, A\mathbf{p}_j)$

$$= \left(\mathbf{r}_{k+1},\ A\frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j-1}}{\alpha_{j-1}}\right) = \frac{1}{\alpha_{j-1}}(\mathbf{r}_{k+1},\ A\mathbf{x}_j - A\mathbf{x}_{j-1})$$

$$= \frac{1}{\alpha_{j-1}}\left(\mathbf{r}_{k+1},\ (\mathbf{b} - A\mathbf{x}_{j-1}) - (\mathbf{b} - A\mathbf{x}_j)\right) = \frac{1}{\alpha_{j-1}}\left\{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{j-1}) - (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_j)\right\}.$$

$j \leqq k-1$ ならば

$$(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_j) = \left(\mathbf{r}_{k+1},\ \mathbf{p}_j + \sum_{i=0}^{j-1}\beta_i^{(j-1)}\mathbf{p}_i\right)$$

$$= \underbrace{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{p}_j)}_{0} + \sum_{i=0}^{j-1}\beta_i^{(j-1)}\underbrace{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{p}_i)}_{0} = 0,$$

同様に $(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{j-1}) = 0 \quad (j \leqq k-1)$

ゆえに, $(\mathbf{r}_{k+1}, A\mathbf{p}_j) = 0 \quad (j \leqq k-1) \quad \therefore\ \beta_j^{(k)} = 0 \quad (j \leqq k-1).$ ⊠)

$$\beta_k^{(k)} = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, A\mathbf{p}_k)}{(\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)} = \frac{1}{\alpha_k}\frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)} = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_k) - \|\mathbf{r}_{k+1}\|^2}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k)}$$

$$(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{r}_{k+1},\ \mathbf{p}_k + \beta_{k-1}^{(k)}\mathbf{p}_{k-1}) = 0,$$

$$(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k) = \left(\mathbf{r}_k,\ \mathbf{r}_k - \sum_{j=0}^{k-1}\beta_j^{(k-1)}\mathbf{p}_j\right) = \|\mathbf{r}_k\|^2, \quad \left(\|\mathbf{x}\| \equiv \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}\right)$$

$$\therefore\ \beta_k^{(k)} = -\frac{\|\mathbf{r}_{k+1}\|^2}{\|\mathbf{r}_k\|^2}, \qquad \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} - \beta_k^{(k)}\mathbf{p}_k.$$

算法 〜共役勾配法〜

$\mathbf{x}_0$ を適当にとる; $\mathbf{r}_0 = \mathbf{p}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$;

$k = 0, 1, 2, \cdots$ に対して

$$\alpha_k = \frac{\|\mathbf{r}_k\|^2}{(\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)};$$

$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k\mathbf{p}_k$;

$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k$;

$\|\mathbf{r}_{k+1}\| \leqq \varepsilon\|\mathbf{b}\|$ なら反復終了; (ε は小さい正数)

$$\beta_k = \frac{\|\mathbf{r}_{k+1}\|^2}{\|\mathbf{r}_k\|^2};$$

$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k\mathbf{p}_k$;

<CG法の改良 〜前処理〜>

CG法 … M.R. Hestines & E. Stiefel:
Methods of conjugate gradients for solving linear systems,
Journal of Research of the National Bureau of Standards,
Vol. 49 (1952), 409–436.

ところが、CG法は丸め誤差に弱いことがわかり、長い間忘れ去られていた

↓

1980年：前処理と併用するとCG法は"使える"ことがわかった。
→ CG法の復活

非対称行列への拡張、安定化に改良版 etc.

前処理 (preconditioning)

CG法は、単位行列に近い係数行列に対しては収束が速い。

* 定理：$\cancel{f(x_k)}\ f(x_k)-f(x^*) \leq \cancel{f(x_0)}\ [f(x_0)-f(x^*)] \cdot 4\left(\dfrac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^{2k}$

ここで、$\kappa = \dfrac{A\text{の最大固有値}}{A\text{の最小固有値}}$. □

(Aが正定値対称行列なら、Aの固有値>0に注意)

(参考) 杉原正顯・室田一雄「線形計算の数理」,
岩波オンデマンドブックス, 2016年.

そこで、
何らかの方法で近似的に $A \approx CC^T$ と分解する (C: 正則行列).

↓

$$Ax = b \iff \underbrace{(C^{-1}AC^{-T})}_{\text{単位行列}I\text{に近い}} C^T x = C^{-1} b \quad (C^{-T} = (C^T)^{-1} = (C^{-1})^T).$$

$Ax = b$ の代わりに $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ ($\tilde{A} = C^{-1}AC^{-T}$, $\tilde{b} = C^{-1}b$, $\tilde{x} = C^T x$) を解けば、CG法の収束が速くなると期待される。
(実際、速くなっている) ……これが前処理。

算法 〜前処理付き共役勾配法(PCG法)〜

x_0 を適当にとる;
$r_0 = b - Ax_0$;
$p_0 = (CC^T)^{-1} r_0$;
$k = 0, 1, 2, \cdots$ に対し

$$\left[\begin{array}{l}
\alpha_k = \dfrac{(r_k, (CC^T)^{-1} r_k)}{(p_k, Ap_k)}; \\
x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k; \\
r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k; \\
\| r_{k+1} \| \leq \varepsilon \| b \| \text{ となったら反復終了}; \\
\beta_k = \dfrac{(r_{k+1}, (CC^T)^{-1} r_{k+1})}{(r_k, (CC^T)^{-1} r_k)}; \\
p_{k+1} = (CC^T)^{-1} r_{k+1} + \beta_k p_k;
\end{array}\right.$$

(注意) $y = (CC^T)^{-1} x$ の計算は連立一次方程式

$$\left\{\begin{array}{l} Cz = x \\ C^T y = z \end{array}\right.$$

を解いて行う(逆行列の計算をしない)。

PCG法の算法の導出: $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ にCG法を適用すると次のようになる:

$\tilde{x}_0$ を適当に選ぶ;
$\tilde{r}_0 = \tilde{p}_0 = \tilde{b} - \tilde{A}\tilde{x}_0$;
$k = 0, 1, 2, \cdots$ に対して

$$\left[\begin{array}{l}
\tilde{\alpha}_k = \| \tilde{r}_k \|^2 / (\tilde{p}_k, \tilde{A}\tilde{p}_k); \\
\tilde{x}_{k+1} = \tilde{x}_k + \tilde{\alpha}_k \tilde{p}_k; \\
\tilde{r}_{k+1} = \tilde{r}_k - \tilde{\alpha}_k \tilde{A} \tilde{p}_k; \\
\tilde{\beta}_k = \| \tilde{r}_{k+1} \|^2 / \| r_k \|^2; \\
\tilde{p}_{k+1} = \tilde{r}_{k+1} + \tilde{\beta}_k \tilde{p}_k;
\end{array}\right.$$

$\tilde{\mathbf{x}} = C^T\mathbf{x}$ であったことを思い出し、$\tilde{\mathbf{x}}_k = C^T\mathbf{x}_k$, $\tilde{\mathbf{p}}_k = C^T\mathbf{p}_k$ とおく。
すると、

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{r}}_k &= \tilde{\mathbf{b}} - \tilde{A}\tilde{\mathbf{x}}_k = C^{-1}\mathbf{b} - (C^{-1}AC^{-T})(C^T\mathbf{x}_k) \\
&= C^{-1}(\mathbf{b} - A\mathbf{x}_k) = C^{-1}\mathbf{r}_k
\end{aligned}
$$

より $\tilde{\mathbf{r}}_k = C^{-1}\mathbf{r}_k$ とおけばよいことがわかる。

$$
\begin{aligned}
(\tilde{\mathbf{p}}_k, \tilde{A}\tilde{\mathbf{p}}_k) &= (C^T\mathbf{p}_k, (C^{-1}AC^{-T})(C^T\mathbf{p}_k)) = (C^T\mathbf{p}_k, C^{-1}A\mathbf{p}_k) \\
&= (\mathbf{p}_k, CC^{-1}A\mathbf{p}_k) = (\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\|\tilde{\mathbf{r}}_k\|^2 &= (\tilde{\mathbf{r}}_k, \tilde{\mathbf{r}}_k) = (C^{-1}\mathbf{r}_k, C^{-1}\mathbf{r}_k) = (\mathbf{r}_k, C^{-T}C^{-1}\mathbf{r}_k) \\
&= (\mathbf{r}_k, (CC^T)^{-1}\mathbf{r}_k)
\end{aligned}
$$

より、$\displaystyle \tilde{\alpha}_k = \frac{(\mathbf{r}_k, (CC^T)^{-1}\mathbf{r}_k)}{(\mathbf{p}_k, A\mathbf{p}_k)}$, $\displaystyle \tilde{\beta}_k = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, (CC^T)^{-1}\mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, (CC^T)^{-1}\mathbf{r}_k)}$.

$\mathbf{x}_k$, $\mathbf{r}_k$, $\mathbf{p}_k$ の更新式は、

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{x}}_{k+1} &= C^T\mathbf{x}_{k+1} = \tilde{\mathbf{x}}_k + \tilde{\alpha}_k\tilde{\mathbf{p}}_k = C^T(\mathbf{x}_k + \tilde{\alpha}_k\mathbf{p}_k), \\
&\longrightarrow \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \tilde{\alpha}_k\mathbf{p}_k, \\
\tilde{\mathbf{r}}_{k+1} &= C^{-1}\mathbf{r}_{k+1} = \tilde{\mathbf{r}}_k - \tilde{\alpha}_k\tilde{A}\tilde{\mathbf{p}}_k = C^{-1}\mathbf{r}_k - \alpha_k(C^{-1}AC^{-T})C^T\mathbf{p}_k \\
&= C^{-1}(\mathbf{r}_k - \tilde{\alpha}_k A\mathbf{p}_k) \\
&\longrightarrow \mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \tilde{\alpha}_k A\mathbf{p}_k, \\
\tilde{\mathbf{p}}_{k+1} &= C^T\mathbf{p}_{k+1} = \tilde{\mathbf{r}}_{k+1} + \tilde{\beta}_k\tilde{\mathbf{p}}_k = C^{-1}\mathbf{r}_{k+1} + \beta_k C^T\mathbf{p}_k \\
&= C^{-1}(\mathbf{r}_{k+1} + \beta_k CC^T\mathbf{p}_k) \\
&\longrightarrow \mathbf{p}_{k+1} = (CC^T)^{-1}\mathbf{r}_{k+1} + \tilde{\beta}_k\mathbf{p}_k
\end{aligned}
$$

と得られる。 $\boxtimes$

不完全Cholesky分解

前処理の例.

対称行列 A に LU分解を施す

→ Cholesky分解（コレスキー）

$$A = LDL^T, \quad L = \begin{bmatrix} l_{11} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n \end{bmatrix}$$

不完全Cholesky分解 … Cholesky分解を近似的に行う

$$A \approx LDL^T$$

具体的には

- $l_{ii} d_i = 1 \quad (i = 1, \cdots, n)$ とする.
- $a_{ij} = 0$ なる (i, j) に対しては $l_{ij} = 0$ とする

↓

$k = 1, 2, \cdots, n$ に対し

$i = 1, 2, \cdots, k-1$ に対し

$$l_{ki} = a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{kj} l_{ij} d_j;$$

$$d_k = \left(a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2 d_j \right)^{-1} \quad (= l_{kk}^{-1});$$

$y = (LDL^T)^{-1} x$ の計算 … $LDL^T y = x$ を前進/後退代入で解く.

ICCG法 … 前処理として不完全Cholesky分解を用いたCG法.

（I … "incomplete" の頭文字）

（参考）森正武「Fortran77数値計算プログラミング 増補版」岩波書店, 1987年.