数理解析研究所講究録
第2037巻 2017年 44-53

特異線形方程式に対する内部反復前処理
Inner-Iteration Preconditioning for Singular Linear Systems

筑波大学 保國 恵一
Keiichi Morikuni
University of Tsukuba

概要

特異線形方程式に対するクリロフ部分空間法の前処理として定常反復法を複数回反復するものを提案する．このような前処理法を内部反復前処理と呼び，前処理される反復法を外部反復と呼ぶ．外部反復法として一般化最小残差法（GMRES 法）及びフレキシブル GMRES 法（FGMRES 法）に内部反復前処理を適用したものが線形方程式の解を与えるための十分条件を示す．ストークス方程式の離散化及び人工的に生成した大規模疎な特異線形方程式のテスト問題に対して，一般化シフト付き分離（GSS）及びエルミート・歪エルミート分離（HSS）を用いた内部反復前処理付き GMRES 法がそれらの分離前処理付き GMRES 法及び FGMRES 法よりも効率が良いこと数値実験で示す．

1 はじめに

線形方程式

$$Ax = b \tag{1.1}$$

を解くことを考える．ただし，$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 及び $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ とする．大規模疎な線形方程式を解くためには効率性及び記憶容量の観点から直接法よりも反復法，特にクリロフ部分空間法が用いられる．係数行列 A が悪条件である場合にはその収束は悪化することがあるが，(1.1) に適切な前処理を施すことで収束を加速することができる．行列 A に対する正則な前処理行列を $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ として，$AP^{-1}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x} = P^{-1}\boldsymbol{u}$ のように前処理を施すことで条件を改善することを考える．

クリロフ部分空間法の標準的な前処理は行列の不完全分解を用いて行うが, 必要な記憶容量はしばしば元の問題を保持するために必要な記憶容量と同等となり, A が特異な場合には計算が破綻したり, 真の解が得られなかったりすることがある. もうひとつの前処理は行列分離を用いて行うものであり, 例えば逐次過緩和法 (SOR 法) のような定常反復法の分離行列を用いることができ, 必要とする記憶容量は少なくて済む. 本稿で提案する前処理は複数回反復を行う定常反復法を用いて行うものであり, 内部反復前処理とよぶ.

内部反復と対比して, 前処理される反復法を外部反復とよんで本稿ではクリロフ部分空間法である一般化最小残差法 (GMRES 法) を用いる. GMRES 法の k 反復目の近似解 $\boldsymbol{x}_k$ は $\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_k\|_2=\min_{\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{x}_0+\mathcal{K}_k}\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|_2$ のように決定する. ここで, $\boldsymbol{x}_0\in\mathbb{R}^n$ は初期近似解, $\mathcal{K}_k=\mathrm{span}\{\boldsymbol{r}_0, A\boldsymbol{r}_0,\ldots,A^{k-1}\boldsymbol{r}_0\}$, $\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0$ は初期残差である. 特異線形方程式 (1.1) に対して適用された GMRES 法は比較的確立されており [5], [13], [12], 解を与えることなく破綻することがある. ただし, GMRES 法が破綻するとは $\dim A\mathcal{K}_k<\dim\mathcal{K}_k$, または $\dim\mathcal{K}_k<k$ が成り立つこととする. GMRES 法が任意の $\boldsymbol{b}\in\mathcal{R}(A)$ 及び任意の $\boldsymbol{x}_0\in\mathbb{R}^n$ に対して破綻することなく $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ の解を与えるための必要十分条件は $\mathcal{N}(A)\cap\mathcal{R}(A)=\{\boldsymbol{0}\}$ である [5, Theorem 2.6], [19, Theorem 2.2]. ただし, $\mathcal{R}(A)$ は A の像空間, $\mathcal{N}(A)$ は A の核空間である. このような条件 $\mathcal{N}(A)\cap\mathcal{R}(A)=\{\boldsymbol{0}\}$ を満たすような行列 A は GP 行列と呼ばれる. GMRES 法の各反復で内部反復数を不変としたもの及び可変としたものをそれぞれ考える. 後者はフレキシブル GMRES 法 (FGMRES 法)[21] と呼ばれ, 定常反復法以外にもクリロフ部分空間法を内部反復前処理に用いることができる (cf. [20]).

一方, 特異線形方程式に対する定常反復法に関しても多くの研究がある [15], [17], [11], [4], [22], [25], [23], [8], [24]. 近代的な定常反復法の分離行列には前処理として有効なものがあり, このような定常反復法を内部反復前処理として GMRES 法に施すことでその収束をさらに加速できることができる.

本論文は文献 [18] を要約したものである.

2 内部反復前処理付き GMRES 法.

GMRES 法に対してある固定した ℓ 反復の定常反復法を右前処理として適用することを考える. そのような内部反復右前処理付き GMRES 法の算法は以下のようである.

Algorithm 1 内部反復前処理付き GMRES 法.

1: Let $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ be the initial iterate. $\boldsymbol{r}_0 := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$, $\beta := \|\boldsymbol{r}_0\|$, $\boldsymbol{v}_1 := \boldsymbol{r}_0/\beta$;
2: **for** $k = 1, 2, \ldots$ until convergence **do**
3: Apply ℓ steps of a stationary iterative method to $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}_k$ to obtain $\boldsymbol{z}_k = C^{(\ell)}\boldsymbol{v}_k$;
4: $\boldsymbol{w} := A\boldsymbol{z}_k$, **for** $i = 1, 2, \ldots, k$ **do** $h_{i,k} := (\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{w})$, $\boldsymbol{w} := \boldsymbol{w} - h_{i,k}\boldsymbol{v}_i$ **end for**
5: **if** $h_{k+1,k} := \|\boldsymbol{w}\| = 0$ **then** set $m := k$ and go to line 7 **else** $\boldsymbol{v}_{k+1} := \boldsymbol{w}/h_{k+1,k}$;
6: **end for**
7: $\boldsymbol{y}_m := \arg\min_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^m} \|\beta\boldsymbol{e}_1 - H_{m+1,m}\boldsymbol{y}\|$, $\boldsymbol{x}_m := \boldsymbol{x}_0 + [\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \ldots, \boldsymbol{z}_m]\boldsymbol{y}_m$;

ここで, $\boldsymbol{e}_i$ は単位行列の第 i 列ベクトル, $H_{m+1,m} = \{h_{i,j}\} \in \mathbb{R}^{m+1,m}$, $C^{(\ell)}$ は ℓ 反復の定常反復法が与える内部反復前処理行列である.

次に具体的な内部反復前処理行列を表す. Algorithm 1の 3 行目における線形方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}_k$ に対して定常反復法を適用することを考える. 行列 A の分離行列 P が正則であるように分離して $A = P - Q$, その反復行列を $R = P^{-1}Q$ とする. 定常反復法の初期近似解を $\boldsymbol{z}_0 = \boldsymbol{0}$ とすると, ℓ 反復目の近似解は $\boldsymbol{z}^{(\ell)} = R\boldsymbol{z}^{(\ell-1)} + P^{-1}\boldsymbol{v}_k = \sum_{i=0}^{\ell-1} R^i P^{-1}\boldsymbol{v}_k$ となる. すると, 内部反復前処理行列は $C^{(\ell)} = \sum_{i=0}^{\ell-1} R^i P^{-1}$ である. さらに, 内部反復前処理を施された行列は $AC^{(\ell)} = P^{-1}(\mathrm{I} - R^\ell)P$ である. ただし, I は単位行列である.

内部反復前処理付き GMRES 法が破綻することなく解を与えるための十分条件は以下のようである.

定理 2.1. 内部反復行列 R が準収束である（$\lim_{i\to\infty} R^i$ が存在する）ならば, 上で定義された $C^{(\ell)}$ による内部反復前処理付き *GMRES* 法は任意の $\boldsymbol{b} \in \mathcal{R}(A)$, 任意の $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, 及び任意の $\ell \in \mathbb{N}$ に対して破綻することなく $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を与える.

準収束性は, ある定常反復法を内部反復前処理として GMRES 法に施したものが解を与えるかどうかの指標となる. 例えば, A が半正定値対称行列であるとき, SOR 法の緩和変数 ω の値を $0 < \omega < 2$ を満たすようにとると SOR 反復行列は準収束である [11, Theorem 13]. 定理 2.1の主張は, 線形方程式 (1.1) が対称半正定値である場合に限れば系として [19, Theorem 4.6] が得られる. 一般の正方行列 A に対してある反復行列 R が準収束であるならば, 変数 $\gamma \in \mathbb{R}$ の値が $0 < \gamma < 2/(1 + \nu(R))$ を満たすと補外付き反復行列 $R_\gamma = (1 - \gamma)\mathrm{I} + \gamma R$ も準収束である [22, Theorem 2.2]. ただし, $\sigma(R)$ を R の固有値全体の集合として, $\nu(R) = \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(R)\backslash\{1\}\}$ は R の疑似

スペクトル半径である．もし A が半正定値（$H=(A+A^{\mathrm{T}})/2$ が半正定値対称）であり，$\mathcal{N}(A)=\mathcal{N}(H)$ であるならば，任意の $\alpha>0$ に対してエルミート・歪エルミート (HSS) の反復行列 $(\alpha\mathrm{I}+S)^{-1}(\alpha\mathrm{I}-H)(\alpha\mathrm{I}+H)^{-1}(\alpha\mathrm{I}-S)$ は準収束である [1, Theorem 3.4]．ただし，$S=(A-A^{\mathrm{T}})/2$ である．これらの他に反復行列が準収束となるような定常反復法には，変数付き宇澤法 [26]，二段階 (two-stage) 法 [24]，一般化シフト付き分離 (generalized shifted splitting, GSS)[7]，エルミート・歪エルミート分離 (Hermitian skew-Hermitian splitting, HSS)[1] とのその派生 [16], [10] 等がある．従って，これらの定常反復法を内部反復前処理として GMRES 法に施したものは破綻することなく解を与えることができる．

3 内部反復前処理付きフレキシブル GMRES 法

前節で導入した内部反復前処理の内部反復数は各外部反復において等しかったが，内部反復数を各外部反復について可変にしたものはフレキシブル GMRES(FGMRES) 法 [21] と呼ばれる．そこで Algorithm 1における k 外部反復目の内部反復前処理行列を $C^{(\ell_k)}$ とすると，FGMRES 法は残差ノルム $\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_k\|$ を最小化するようにして近似解 $\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{F}}$ をアファイン空間 $\boldsymbol{x}_0+\mathcal{R}([C^{(\ell_1)}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{F}},C^{(\ell_2)}\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{F}},\dots C^{(\ell_k)}\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{F}}])$ 中で決定する．この空間はクリロフ部分空間とは異なるため，FGMRES 法の収束性は必ずしも定理 2.1に従うとは限らない．これ以降では FGMRES 法に関する記号は上付き添字 F を伴って書くことにする．FGMRES 法の第 k 反復の近似解は，Algorithm 1と同様にして $\boldsymbol{z}_k^{\mathrm{F}}=C^{(\ell_k)}\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{F}}$ とおいて $\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{F}}=\boldsymbol{x}_0+[\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{F}},\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{F}},\dots,\boldsymbol{z}_k^{\mathrm{F}}]\boldsymbol{y}_k^{\mathrm{F}}$ である．FGMRES 法が破綻することは $h_{k+1,k}^{\mathrm{F}}=0$ であるが，任意の $\boldsymbol{b}\in\mathcal{R}(A)$ に対して $A\boldsymbol{z}_k^{\mathrm{F}}=AC^{(\ell_k)}\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{F}}\neq\boldsymbol{0}\Leftrightarrow\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{F}}\neq\boldsymbol{0}$ であることの必要十分条件は $AC^{(\ell_k)}$ が GP 行列であることである．これは内部反復前処理行列 H が準収束であるならば十分である．

一方，行列 A のフレキシブル版アーノルディ分解 $A[\boldsymbol{z}_1^{\mathrm{F}},\boldsymbol{z}_2^{\mathrm{F}},\dots,\boldsymbol{z}_k^{\mathrm{F}}]=[\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{F}},\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{F}},\dots,\boldsymbol{v}_{k+1}^{\mathrm{F}}]H_{k+1,k}^{\mathrm{F}}$ における $H_{k+1,k}^{\mathrm{F}}$ の QR 分解を $H_{k+1,k}^{\mathrm{F}}=Q_k^{\mathrm{T}}R_k$ とする．ただし，$Q_k\in\mathbb{R}^{(k+1)\times(k+1)}$ はギブンス回転行列 $\Omega_i=\mathrm{I}_{i-1}\oplus\left[\begin{smallmatrix}c_i & s_i\\ -s_i & c_i\end{smallmatrix}\right]\oplus\mathrm{I}_{k-i}$ の積 $Q_k=\Omega_k\Omega_{k-1}\cdots\Omega_1$，$R_k\in\mathbb{R}^{(k+1)\times k}$ は上三角行列である (c_i，$s_i\in\mathbb{R}$)．すると，FGMRES 法が破綻することなく解を与える条件は以下のように与えられる．

定理 3.1. 内部反復行列 R が準収束であり，第 k 外部反復における内部反復が $\|\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{F}}-A\boldsymbol{z}_k^{\mathrm{F}}\|<|c_k|$ を満たすように線形方程式 $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{F}}$ を解くならば，任意の $\boldsymbol{b}\in\mathcal{R}(A)$ 及び任意の $\boldsymbol{x}_0\in\mathbb{R}^n$ に対して内部反復前処理付き *FGMRES* 法は破綻することなく $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ の解を与える．

4 数値実験.

内部反復前処理付き GMRES 法及び FGMRES 法が実際に有効であることを検証し，従来法とも比較して計算時間について前者が優れることを数値実験で示す．そのために離散化したストークス方程式及び人工的に乱数で生成したテスト問題を例として取り上げる．内部反復処理の例としては一般化シフト付き分離 (GSS)[9] 及びエルミート・歪エルミート分離 (HSS)[2] を用いる．

内部反復及び外部反復の初期近似解はゼロとした．GMRES 法及び FGMRES 法はリスタートを行わなかった．FGMRES 法が破綻することなく解を与えることを保証するため，内部反復で線形方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{v}_k$ を解くときの停止条件は $\|\boldsymbol{v}_k - A\boldsymbol{z}_k\| < |c_k|$ とした (定理 3.1)．ただし，FGMRES 法の最大内部反復は n とした．GMRES 法及び FGMRES2 法の停止条件は $\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k\|_2 \leq 10^{-6}\|\boldsymbol{b}\|_2$ とした．

数値実験を行った計算機の中央演算処理装置はインテルジーオン E5-2670 2.5 ギガヘルツ，主記憶装置は 250 ギガバイト，及び基本ソフトウェアはセントオーエス (Community Enterprise Operating System, CentOS) バージョン番号 6.8 である．反復法のプログラムは Matlab 2014b で記述し，倍精度浮動小数点演算を用いた．

4.1 一般化シフト付き分離 (GSS)

本節の実験で比較する反復法は，前処理なし GMRES 法，GSS 前処理付き GMERS 法，及び ℓ 反復の GSS 反復

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\alpha\mathrm{I}+C & B^{\mathsf{T}}\\ -B & \beta\mathrm{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{z}^{(i+1)} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\alpha\mathrm{I} & -B^{\mathsf{T}}\\ B & \beta\mathrm{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{z}^{(i)} + \boldsymbol{d}, \quad i = 1, 2, \dots, \ell \tag{4.1}$$

を内部反復前処理として施した GMRES 法，及び第 k 外部反復で ℓ_k 反復の GSS 反復を内部反復前処理として施した FGMRES 法である．テスト問題はストークス方程式を離散化したものであり，二次元の開領域 Ω 内で速度のベクトル場 $\boldsymbol{u}$ と圧力 p が $-\mu\Delta\boldsymbol{u} + \nabla p = \boldsymbol{f}$, $\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0$, 境界条件 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$, $\partial\Omega$, 及び正規化条件 $\int_\Omega p(x)\mathrm{d}x = 0$ に従うような問題を考える．ここで，μ は粘性係数，$\boldsymbol{f}$ は外力である．ストークス方程式を正方領域 $\Omega = (0,1)\times(0,1)$ での等間隔格子による差分法で離散化すると鞍点問題の構造をもつ特異線形方程式

$$A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix}C & B^{\mathsf{T}}\\ -B & \mathrm{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad B \in \mathbb{R}^{q\times p}, \tag{4.2}$$

が得られ, $C=(\mathrm{I}_q\otimes T+T\otimes\mathrm{I}_q)\oplus(\mathrm{I}_q\otimes T+T\otimes\mathrm{I}_q)\in\mathbb{R}^{2q^2\times 2q^2}$ は正定値,

$$
\begin{aligned}
&B^\top=[\hat{B}^\top,\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2]\in\mathbb{R}^{2q^2\times(q^2+2)},\quad \hat{B}^\top=\begin{bmatrix}\mathrm{I}_q\otimes F\\ F\otimes\mathrm{I}_q\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{2q^2\times q^2},\\
&\boldsymbol{b}_1=\hat{B}^\top\begin{bmatrix}\boldsymbol{e}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}_2=\hat{B}^\top\begin{bmatrix}\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{e}\end{bmatrix},\\
&T=\mu h^{-2}\mathrm{tridiag}(-1,2,-1)+(2h)^{-1}\mathrm{tridiag}(-1,1,0)\in\mathbb{R}^{q\times q},\\
&F=h^{-1}\mathrm{tridiag}(-1,1,0)\in\mathbb{R}^{q\times q}
\end{aligned}
$$

となる. ただし, $\otimes$ はクロネッカー積, O はゼロ行列, $\boldsymbol{e}=[1,1,\ldots,1]^\top\in\mathbb{R}^{q^2/2}$, $h=(q+1)^{-1}$ は離散化格子幅である [3]. 係数行列 A の (2,1) 及び (1,2) ブロック要素はランク落ちとなるように修正を施した [26, section 5], [7, Example 4.1]. 線形方程式 (4.2) の右辺ベクトルは $\boldsymbol{b}=A\boldsymbol{e}$ とした.

線形方程式 (4.2) の係数行列 A は正定値であるため, GSS 内部反復行列は任意の α, $\beta>0$ に対して準収束であり [7, Theorem 3.2], GSS 内部反復前処理付き GMRES 法は破綻することなく (4.2) の解を与える (定理 2.1).

図 4.1は比較する反復法を線形方程式 (4.2) に適用したときの収束履歴である. 横軸は計算時間 [秒], 縦軸は相対残差 $\|\boldsymbol{r}_k\|/\|\boldsymbol{b}\|$ を表す. ただし, 格子点数は 36×36, 粘性係数の値は $\mu=10^{-5}$, GSS 前処理及び GSS 内部反復前処理の変数 α の値は 57, 変数 β の値は $\|B\|^2/\|C\|$ とした [6]. GSS 内部反復前処理付き GMRES 法が最も短い計算時間で収束した. ここで, 内部反復数 ℓ は 3 とした. FGMRES 法は内部反復で停止条件 $\|\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{F}}-A\boldsymbol{z}_{k+1}^{\mathrm{F}}\|<|c_k|$ を満たすまで線形方程式 $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{v}_k$ を解くために要した計算量が多く, 収束するために他の手法よりも計算時間を多く要した.

4.2 エルミート・歪エルミート分離 (HSS)

本節の実験で比較する反復法は, 前処理なし GMRES 法, HSS 前処理付き GMERS 法, 及び ℓ 反復の HSS 反復

$$
\begin{cases}(\alpha\mathrm{I}+H)\boldsymbol{z}^{(i+1/2)}=(\alpha\mathrm{I}-S)\boldsymbol{z}^{(i)}+\boldsymbol{v}_k,\\ (\alpha\mathrm{I}+S)\boldsymbol{z}^{(i+1)}=(\alpha\mathrm{I}-H)\boldsymbol{z}^{(i+1/2)}+\boldsymbol{v}_k,\end{cases}\qquad i=1,2,\ldots,\ell \tag{4.3}
$$

を内部反復前処理として施した GMRES 法 , 及び第 k 外部反復で ℓ_k 反復の GSS 反復を内部反復前処理として施した FGMRES 法である. ここでは (1.1) の係数行列が一般化鞍

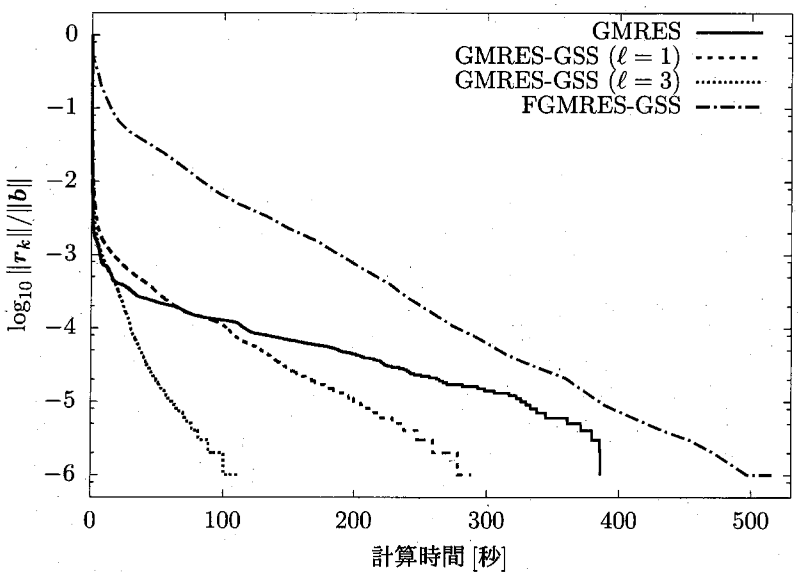

図 4.1　離散化したストークス方程式に対する反復法の収束履歴.

点問題の構造

$$A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} B & E \\ -E^{\mathsf{T}} & C \end{bmatrix} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{4.4}$$

をもつ場合を考える．ただし，$B \in \mathbb{R}^{p\times p}$ 及び $C \in \mathbb{R}^{q\times q}$ は半正定値対称とする．いま，i, $j \in \mathbb{N}$, $\kappa = 10^{-j}$, $\sigma(i) = \kappa^{i/(p-q-1)}$, $U \in \mathbb{R}^{p\times p}$ と $V \in \mathbb{R}^{q\times q}$ を

$$U^{\mathsf{T}}BU = \mathrm{diag}(\sigma(1), \sigma(2), \dots, \sigma(p-q-1)) \oplus \mathrm{O} \in \mathbb{R}^{p\times p},$$
$$V^{\mathsf{T}}CV = \mathrm{diag}(\sigma(1), \sigma(2), \dots, \sigma(q-2)) \oplus \mathrm{O} \in \mathbb{R}^{q\times q},$$

及び $U^{\mathsf{T}}EV = \left[\begin{smallmatrix} V^{\mathsf{T}}CV \\ \mathrm{O} \end{smallmatrix}\right] \in \mathbb{R}^{p\times q}$ であるような直交行列とする．ただし，$F \oplus \mathrm{O} = \left[\begin{smallmatrix} F & \mathrm{O} \\ \mathrm{O} & \mathrm{O} \end{smallmatrix}\right]$ は行列 F と O のクロネッカー和である．すると，線形方程式 (4.4) に対する HSS 反復行列は準収束であり [1, Theorem 3.6]，定理 2.1より HSS 内部反復前処理付き GMRES 法は破綻することなく (4.4) の解を与える．各変数の値は $j = 9$, $q = 64$, $p = q^2$, A の非ゼロ要素密度は 0.1% とした．すると，A の条件数は $\|A\|_2\|A^{\dagger}\|_2 = 2 \times 10^9$ である．ただし，$A^{\dagger}$ は A の疑似逆行列である．右辺ベクトルは $\boldsymbol{b} = A[1, 2, \dots, n]^{\mathsf{T}}$ とした．

図 4.2は比較する反復法を線形方程式 (4.4) に適用したときの収束履歴である．横軸は計算時間 [秒]，縦軸は相対残差 $\|\boldsymbol{r}_k\|/\|\boldsymbol{b}\|$ を表す．HSS 内部反復前処理付き GMRES 法が

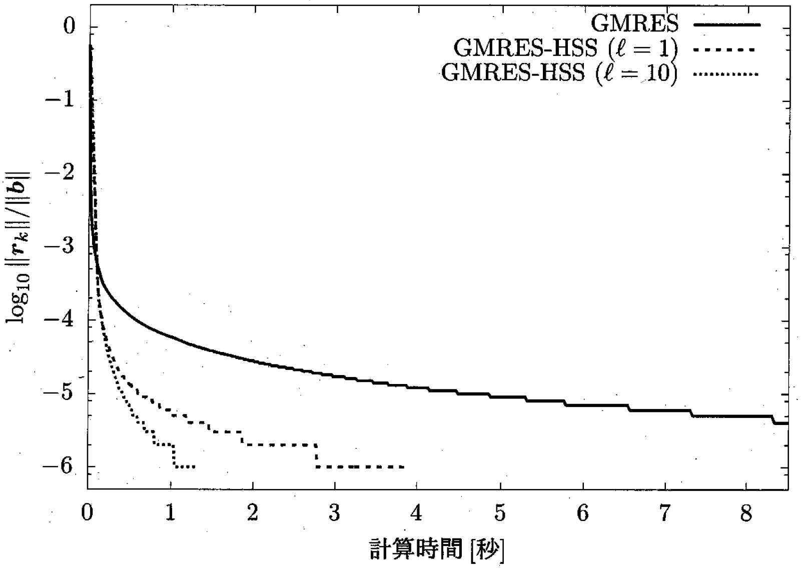

図 4.2　人工的に生成した悪条件問題に対する反復法の収束履歴.

最も短い時間で収束した. ここで, 内部反復数 ℓ は 10 とした. FGMRES 法は第 1 外部反復において内部反復数が最大内部反復数 n に達しても停止条件を満たさなかったため収束しなかった. ただし, $\alpha > 0$ の値は [14] の手法を用いて決定し, 要した計算時間は 0.019 秒であった.

5　まとめ.

GMRES 法及び FGMRES 法の前処理に複数回反復を行う定常反復法を用いることを内部反復前処理として提案し, それらが特異線形方程式の解を与える十分条件を示した. 問題が大規模で悪条件である場合, GSS 及び HSS 内部反復前処理付き GMRES 法はその単独前処理付き GMRES 法よりも効率的に求解できることを数値実験で示した.

謝辞

本研究は JSPS 科研費 16K17639 の助成を受けたものである。

参考文献

[1] Z.-Z. Bai, *On semi-convergence of Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for singular linear systems*, Computing, 89 (2010), pp. 171–197.

[2] Z.-Z. Bai, G. H. Golub, and M. K. Ng, *Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for non-Hermitian positive definite linear systems*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 24 (2003), pp. 603–626.

[3] Z.-Z. Bai, G. H. Golub, and J.-P. Pan, *Preconditioned hermitian and skew-hermitian splitting methods for non-hermitian positive semidefinite linear systems*, Numer. Math., 98 (2004), pp. 1–32.

[4] M. Benzi and D. B. Szyld, *Existence and uniqueness of splitting for stationary iterative methods with applications to alternating methods*, Numer. Math., 76 (1997), pp. 309–321.

[5] P. N. Brown and H. F. Walker, *GMRES on (nearly) singular systems*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 18 (1997), pp. 37–51.

[6] Y. Cao, S. Li, and L.-Q. Yao, *A class of generalized shift-splitting preconditioners for nonsymmetric saddle point problems*, Appl. Math. Lett., 49 (2015), pp. 20–27.

[7] Y. Cao and S.-X. Miao, *On semi-convergence of the generalized shift-splitting iteration method for singular nonsymmetric saddle point problem*, Comput. Math. Appl., 71 (2016), pp. 1503–1511.

[8] Z.-H. Cao, *Semiconvergence of extrapolated iterative method for singular linear systems*, Appl. Math. Comp., 156 (2004), pp. 131–136.

[9] C. Chen and C. Ma, *A generalized shift-splitting preconditioner for saddle point problems*, Appl. Math. Lett., 43 (2015), pp. 49–55.

[10] F. Chen and Q.-Q. Liu, *On semi-convergence of modified HSS iteration methods*, Numer. Algorithms, 64 (2013), pp. 507–518.

[11] A. Dax, *The convergence of linear stationary iterative processes for solving singular unstructured systems of linear equations*, SIAM Review, 32 (1990), pp. 611–635.

[12] L. Eldén and V. Simoncini, *Solving ill-posed linear systems with GMRES and*

a singular preconditioner, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 33 (2012), pp. 1369–1394.

[13] K. Hayami and M. Sugihara, *A geometric view of Krylov subspace methods on singular systems*, Numer. Linear Algebra Appl., 18 (2011), pp. 449–469.

[14] Y.-M. Huang, *On m-step Hermitian and skew-Hermitian splitting preconditioning methods*, J. Engrg. Math., (2014).

[15] H. B. Keller, *On the solution of singular and semidefinite linear systems by iteration*, J. Soc. Indust. Appl. Math. Ser. B Numer. Anal., 2 (1965), pp. 281–290.

[16] W. Li, Y.-P. Liu, and X.-F. Peng, *The generalized HSS method for solving singular linear systems*, J. Comput. Appl. Math., 236 (2012), pp. 2338–2353.

[17] C. D. Meyer, Jr., and R. J. Plemmons, *Convergent powers of a matrix with applications to iterative methods for singular linear systems*, SIAM J. Numer. Anal., 14 (1977), pp. 699–705.

[18] K. Morikuni, *Inner-iteration preconditioning for singular linear systems*, arXiv prepr., arXiv:1504.01713v2 (2016), pp. 1–17.

[19] K. Morikuni and K. Hayami, *Convergence of inner-iteration GMRES methods for rank-deficient least squares problems*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 36 (2015), pp. 225–250.

[20] K. Morikuni, L. Reichel, and K. Hayami, *FGMRES for linear discrete ill-posed problems*, Appl. Numer. Math., 75 (2014), pp. 175–187.

[21] Y. Saad, *A flexible inner-outer preconditioned GMRES algorithm*, SIAM J. Sci. Comput., 14 (1993), pp. 461–469.

[22] Y. Song, *Semiconvergence of extrapolated iterative methods for singular linear systems*, J. Comput. Appl. Math., 106 (1999), pp. 117–129.

[23] Y. Song and L. Wang, *On the semiconvergence of extrapolated iterative methods for singular linear systems*, Appl. Numer. Math., 44 (2003), pp. 404–413.

[24] L. Wang, *Semiconvergence of two-stage iterative methods for singular linear systems*, Linear Algebra Appl., 422 (2007), pp. 824–838.

[25] J.-Y. Yuan, *The Ostrowski-Reich theorem for SOR iterations: extentions to the rank deficient case*, Linear Algebra Appl., 2000 (2000), pp. 189–196.

[26] B. Zheng, Z.-Z. Bai, and X. Yang, *On semi-convergence of parameterized Uzawa methods for singular saddle point problems*, Linear Algebra Appl., 431 (2009), pp. 808–817.