

半正定値系に対する右前処理 MINRES 法

杉原 光太

博士（情報学）

総合研究大学院大学

複合科学研究科

情報学専攻

平成 28（2016）年度

博士論文
半正定値系に対する右前処理 MINRES 法

杉原 光太
総合研究大学院大学

Right Preconditioned MINRES for
Positive Semidefinite Systems

Kota Sugihara
SOKENDAI (The Graduate University for Advanced Studies)
2016 年 9 月

主指導教員，スーパーバイザー

速水謙
国立情報学研究所
総合研究大学院大学

指導教員，サブアドバイザー

合田 憲人
国立情報学研究所
総合研究大学院大学

サブアドバイザー

今倉暁
筑波大学

他の審査委員

杉原 正顕
青山学院大学
宇野 毅明
国立情報学研究所
総合研究大学院大学
後藤田 洋伸
国立情報学研究所
総合研究大学院大学

概要

大規模疎で対称特異な連立一次方程式を，数値的に効率よく解くことを考える．係数行列が半正定値で，右辺ベクトルが係数行列の値域に入らない場合，CG 法は最小二乗解への収束が保証されていないことから，MINRES 法を採用する．MINRES 法は残差の 2 ノルムを最小化する解法である．本論文では，右前処理 MINRES 法の定式化を行う．そこで，右前処理 MINRES 法は，正則な系のみならず，特異系に対しても，任意の右辺ベクトル，任意の初期ベクトルに対して，前処理行列に関するノルムの意味で残差が最小となる解に破綻することなく収束することを証明する．特に，consistent な系の場合，初期ベクトルを係数行列に対して右前処理した行列の値域に入るようにとれば，前処理行列に関するノルムでの最小ノルム解に収束することも証明する．さらに，通常，CG 法の両側前処理の計算量を削減するのに用いられる Eisenstat's trick を SSOR 右前処理に適用した MINRES 法を提案し，同手法の有効性を電磁場解析などで生じる半正定値系に対する数値実験により検証する．最後に，反復をリスタートすることにより，残差をさらに小さくできることを示す．

Abstract

Consider solving large sparse symmetric singular linear systems. We first introduce the algorithm for the right preconditioned MINRES and prove that the right preconditioned MINRES converges to the preconditioner weighted least squares solution without breakdown for an arbitrary right hand side vector and an arbitrary initial vector even if the linear system is singular. Especially, when the linear system is consistent, we prove that the right preconditioned MINRES converges to a min-norm solution with respect to the preconditioner if the initial vector is in the range space of the right preconditioned coefficient matrix.

Further, we propose the right preconditioned MINRES using SSOR with Eisenstat's trick. Some numerical experiments on semi-definite systems in electromagnetic analysis etc. indicate that the right preconditioned MINRES using Eisenstat SSOR is efficient and robust. Finally, we show that the residual norm can be further reduced by restarting the iterations.

目次

1	はじめに	7
1.1	正則系と特異系	7
1.2	特異系と半正定値系	8
1.3	研究課題	9
2	応用分野	11
2.1	応用分野 1 (全周ノイマン問題)	11
2.2	応用分野 2 (準定常電磁場解析)	11
2.3	応用分野 3 (静磁場問題)	11
3	関連研究	13
3.1	Krylov 部分空間法	13
3.2	前処理	15
4	MINRES 法	18
4.1	MINRES 法の実装アルゴリズム	18
4.2	MINRES 法の理論的アルゴリズム	19
5	前処理付き MINRES 法	20
5.1	右前処理と左前処理	20
5.2	右前処理 MINRES 法	23
5.3	右前処理 MINRES 法の収束解析	25
5.4	収束判定方法	37
6	E-SSOR 右前処理 MINRES 法	38
6.1	E-SSOR 右前処理 MINRES 法の導出	40
6.2	E-SSOR 右前処理 MINRES 法における Eisenstat's trick による演算量の削減効果	41
7	数値実験・結果 (E-SSOR 右前処理 MINRES 法の検証)	43
7.1	E-SSOR 右前処理 MINRES 法における Eisenstat's trick による計算時間の削減効果	44
7.2	数値実験 1 (準定常電磁場解析)	45
7.3	数値実験 2 (静磁場問題)	49
7.4	数値実験 3 (The University of Florida Sparse Matrix Collection)	51

8	数値実験・結果 (リスタート MINRES 法)	57
8.1	リスタートによる MINRES 法の精度の向上	57
8.2	MINRES 法を自動的にリスタートする方式	60
9	Inconsistent な系に対する E-SSOR 右前処理 MINRES 法の解の精度	67
9.1	係数行列が bcsstk25 , bcsstk36 である inconsistent な系に対する解の精度 .	67
9.2	自動リスタート MINRES 法の性能	69
9.3	静磁場問題における inconsistent な系に対する解の精度	71
10	まとめ	77
11	今後の研究課題	78
付録. 1	CG 法のアルゴリズム	83
付録. 2	GMRES 法のアルゴリズム	84
付録. 3	自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法と GMRES 法の比較	85
付録. 4	Eisenstat's trick の適用範囲ならびに Eisenstat IC(0) 右前処理 MINRES 法	90
付録. 5	4 倍精度演算と倍精度演算の比較による , 丸め誤差の影響の検証	93
付録. 6	Inconsistent な系ならびに悪条件な系に対する関連手法の数値実験・結果	100
6-1.	悪条件かつ inconsistent な系に対する MR-2 法と RRMF 法	100
6-2.	静磁場問題における inconsistent な系に対する MR-2 法の数値実験 (実用 性検証)	107
6-3.	悪条件かつ inconsistent な系に対する MINRES-QLP 法	107

謝辞

本研究の遂行ならびに本論文の作成は、セミナー、研究会や講義を通じ数多くの数学的示唆ならびに数値解析の知見を与えていただくとともに、常日頃、筆者を叱咤激励していただいた指導教官速水謙先生のご指導がなければ考えられなかったことです。本当にありがとうございました。

本研究に関して有益な示唆をいただいた、杉原正顯先生、保國恵一博士に感謝いたします。特に杉原正顯先生には、本研究の数学的理論解析である 5.3 節で示した右前処理 MINRES 法の収束定理を証明するきっかけを著者にご示唆いただき、研究の新規性、重要性が高まりました。また審査にも加わっていただきました。あらためて厚くお礼申し上げます。

今倉暁先生にはサブアドバイザーを引き受けていただいたことにのみならず、研究会や審査を通じ、数値線形代数の知見や本数値実験の評価方法などご示唆いただき、感謝しております。厚く御礼申し上げます。

サブアドバイザーである合田憲人先生ならびに審査に加わっていただいた宇野毅明先生、後藤田 洋伸先生には、有益なご助言をいただき、改めて感謝しております。厚くお礼申し上げます。

本研究の数値実験において、応用分野として電磁場解析の行列データならびに右辺ベクトルデータをご提供いただいた岩下武史先生、五十嵐一先生に感謝いたします。

また博士課程の中で議論などをし、収束改善のためのリスタート計算といった貴重なご助言をいただいた Ning Zheng さんに感謝いたします。

1. はじめに

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を大規模疎で特異対称行列, $x, b \in \mathbb{R}^n$ とし, 連立一次方程式

$$(1.1) \quad Ax = b$$

または最小二乗問題 ([3])

$$(1.2) \quad \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2$$

を数値的に解くことを考える．ここで, 右辺ベクトル b は $R(A)$ (A の像空間) に必ずしも属さないものと仮定する．以降, 連立一次方程式の右辺ベクトル b が $R(A)$ に属しているか否かで (1.1), (1.2) を以下のように呼ぶ．

- consistent : $b \in R(A)$
- inconsistent : $b \notin R(A)$

本研究では, 5 章までは特異対称系に対する前処理付き反復法の定式化ならびにその手法の収束定理の証明といった理論的解析を行う．ここで言う理論的解析とは, 丸め誤差による数値誤差がないという仮定の上での解析である．6 章からは, 5 章までの議論を踏まえた前処理を提案し, 特異対称系の部分集合である半正定値対称系 ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が半正定値行列) に対して数値実験を行い, その有効性を検証する．今回特異系のうちの半正定値系に対して数値実験による検証を行ったのは, 電磁場解析といった応用分野で生じる半正定値系に対して, 前処理付き反復法の開発の必要性があったのがきっかけである．

1.1 正則系と特異系

本節では本研究の位置づけを論じる．なお, 1 節にて述べたように, 本研究が扱う系の係数行列は対称とする．

正則系に対する前処理付き反復法の詳細は文献 [33] を参照されたい．

正則系に対する前処理付き反復法に対して, 特異系に対する前処理付き反復法を検討するにあたり注意点として, 以下の点が挙げられる．

- 正則系に対して収束が保証されている反復法は必ずしも特異系に適用した場合, 収束するとは限らない．
- 係数行列の核空間の自由度があるため, 解が必ずしも一意に決まらない．
- 前処理付き反復法が収束に要する反復数が多くなるまたは十分な精度の解が得にくい場合がある．
- 正則系のうち, 特に定値系の前処理を特異系に利用する場合には工夫が必要になる場合がある．

一番目の注意点において既存の反復法のうち、今回特異対称系の反復法として MINRES 法 ([12, 16, 30, 43]) を採用した根拠は、3.1.2 節にて述べる。

二番目の注意点において解が一意に決まらない点は、特異系を解く場合はやむ得ず、連立一次方程式 (1.1) または最小二乗問題 (1.2) の解の一つが得られればよいとする。

実際、今回数値実験に用いた準定常電磁場解析 ([24]) や静磁場問題 ([23]) で得られる係数行列が半正定値であり、consistent な系 (静磁場問題は右辺ベクトルを係数行列の値域に射影) を不完全コレスキ分解前処理付き CG 法 (ICCG 法と略記する) と CG 法で解く場合について、数学的には両手法で得られる解 x は必ずしも一致するとは限らないが、残差ベクトル $r = b - Ax$ が十分小さくなったとき、各々の反復法が収束したと判定し、その解を利用している。

三番目の注意点において対称系で悪条件な問題に対する反復法の関連研究としては、最小二乗解のうち、解自体の二乗ノルムが最小となる解を得る手法として、3.1.4 節で報告する MINRES-QLP 法 ([5–7]) や 3.1.5 節で報告する MR-2 法 ([17])、Range Restricted Minimal Residual(RRMR) 法 ([4]) がある。本論文にて 6 章で提案する Eisenstat's trick を SSOR 右前処理に適用した MINRES 法の性能を、MINRES-QLP 法、MR-2 法ならびに RRMR 法の性能と、係数行列が対称半正定値であり、inconsistent な問題によって数値実験で比較し、提案手法が正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar\|_2}{\|Ab\|_2}$ をより小さくできるという意味で精度のよい解が得られることを示す。

四番目の注意点においては、係数行列が正定値の場合、6 章で論じるように今回用いた SSOR 法を前処理として用いる場合、係数行列が正定値の場合は対角項が全て正の値なので、係数行列の対角成分による対角行列を利用できる。しかしながら係数行列が特異行列の場合は対角項の値が全て正とは限らないので、対角行列の対角項の成分を元の係数行列の対角項をそのまま用いることはできない。7 章では、今回の数値実験にて工夫した点を報告している。不完全コレスキー分解や修正コレスキー分解については、3.2.1 節で論じる。

1.2 特異系と半正定値系

半正定値系は特異系の部分集合である。特異系には半正定値系以外に不定値特異系があり、応用分野として、非圧縮流体を記述する Stokes 方程式を有限要素法の一つの手法で離散化した際に得られる系がある ([42])。

半正定値系の応用分野として、2.1 節にて全周ノイマン問題、2.2 節にて準定常電磁場解析、2.3 節にて静磁場問題を報告する。

1.3 研究課題

係数行列が特異な場合，以下の理由から連立一次方程式が inconsistent になる可能性がある．

1. 領域近似誤差
2. 右辺ベクトルを設定する際の誤差 (観測誤差)
3. 現象をモデリングする際の誤差

ところで，係数行列が特異な場合，連立一次方程式が consistent か inconsistent かは事前にはわからない場合がある．対称半正定値な係数行列をもつ連立一次方程式が consistent な場合，CG 法は一つの解を与えることが数学的に保証されているが，inconsistent な場合には，最小二乗解に収束するとは限らない．そこで，我々は対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式が inconsistent な場合でも最小二乗解を与える MINRES 法を反復法として選択する．

そこで本論文では係数行列の特異性を考慮した MINRES 法の前処理法を提案する [35–40] ．

本論文では，右前処理 MINRES 法の定式化を行い，前処理行列を M としたとき，正則系だけでなく，特異系に対しても M^{-1} に関するノルムでの残差ノルムを最小化する解に破綻することなく収束するという定理を示す．その上で，CG 法の両側前処理において計算量削減のために用いられる Eisenstat's trick をこの右前処理 MINRES 法にも使えるようにした，Eisenstat SSOR 右前処理 MINRES 法 (以後 E-SSOR 右前処理 MINRES 法と呼ぶ) を提案する．また，数値実験により，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の有効性を検証する．

本論文の構成は以下のものである．第 2 章では本研究の物理的な応用分野について述べる．第 3 章では関連研究として基礎反復法に用いる Krylov 部分空間法として，CG 法，MINRES 法，GMRES 法，MINRES-QLP 法，MR-2 法について論じる．さらに前処理として不完全コレスキ分解法ならびに内部反復法について記述し，特に特異系に適用する場合の注意点を論じる．第 4 章では，consistent，inconsistent に関わらず，対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式の (最小二乗) 解を得るために，本研究で採用する MINRES 法のアルゴリズムについて論じる．次に第 5 章では，特異な係数行列をもつ連立一次方程式に対し，右前処理した場合と左前処理した場合の問題の等価性を，連立一次方程式が consistent，inconsistent な場合に分けて論じる．そして今回の研究では右前処理を採用し，右前処理 MINRES 法の定式化を行い，その収束定理を示す．第 6 章では E-SSOR 右前処理 MINRES 法を提案する．第 7 章では E-SSOR 右前処理 MINRES 法，スケーリング右前処理 MINRES 法，前処理なし MINRES 法を対称半正定値な係数行列をもつ連立一次方程式に適用した場合の数値実験を通して，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の有効性を検証

する．第 8 章では MINRES 法をリスタートすることを提案し，残差をさらに小さくできる事例があることを示す．第 9 章では inconsistent な系に対し，リスタート計算を含めて E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用し，正規方程式の相対残差ノルムにより解の精度を評価する．第 10 章でまとめを行い，第 11 章にて今後の研究課題を述べる．さらに付録において，付録. 3 では MINRES 法に比べ，丸め誤差に強い GMRES 法と本研究で提案するリスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法を係数行列が悪条件で inconsistent な系に適用した場合の数値実験結果を比較する．付録. 4 では Eisenstat's trick を IC(0) 右前処理に適用した MINRES 法を inconsistent な系に適用したときの数値実験結果を報告し，本研究で提案する E-SSOR 右前処理 MINRES 法と性能を比較する．付録. 5 では 4 倍精度演算による E-SSOR 右前処理 MINRES 法の数値実験結果を報告し，丸め誤差の影響を検証する．付録. 6 では MR-2 法，Range Restricted Minimal Residual(RRMR) 法と MINRES-QLP 法という関連研究の手法を inconsistent な系で特に係数行列が悪条件である場合を中心に適用したときの数値実験結果を報告し，本研究で提案する E-SSOR 右前処理 MINRES 法と性能を比較する．

2. 応用分野

本節では今回の研究対象の特異系のうち，特に半正定値系の応用分野を論じる．

2.1 応用分野 1 (全周ノイマン問題)

(1.1) の応用分野の一つとして，次の全周ノイマン問題が挙げられる ([27]) ．

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (B \nabla u) &= f \text{ in } \Omega \in \mathbb{R}^d \\ -n \cdot (B \nabla u) &= g \text{ on } \Gamma \end{aligned}$$

ここで $B(x) \in L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{d \times d})$ は半正定値関数とする．

この問題を有限差分法や有限要素法で離散化する際，領域 Ω を多角形 $\hat{\Omega}$ で近似することによる近似誤差が混入するため，対称半正定値な係数行列をもつ，inconsistent な連立一次方程式が得られることが報告されている ([27]) ．

2.2 応用分野 2 (準定常電磁場解析)

(1.1) の応用分野の一つとして，次の準定常電磁場解析が挙げられる ([24]) ．

$$\begin{aligned} \nabla \times (\mu \nabla \times \vec{A}_m) + j\omega\sigma(\vec{A}_m + \nabla V) &= \vec{J}_0 \\ j\omega \nabla \cdot \sigma(\vec{A}_m + \nabla V) &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{J}_0 &= 0 \end{aligned}$$

ここで \vec{A}_m はベクトルポテンシャル， V はスカラーポテンシャル， \vec{J}_0 は強制電流， μ は磁気抵抗率， ω は角周波数， σ は導電率を表す．この偏微分方程式を辺有限要素法で離散化し， \vec{A}_m ， V を未知数とした時，係数行列が半正定値で consistent な連立一次方程式が得られる．辺有限要素法による離散化による数値誤差により， $\nabla \cdot \vec{J}_0 = 0$ は厳密には満たされないことはあるが，今回の定式化に当たっては離散化後も $\nabla \cdot \vec{J}_0 = 0$ が満たされた問題として解くので consistent な系になり，物理的にも consistent な系としないという意味をなさない．

2.3 応用分野 3 (静磁場問題)

(1.1)，(1.2) の応用分野の一つとして，次の静磁場問題が挙げられる ([23]) ．

$$\nabla \times (\mu \nabla \times \vec{A}_m) = \vec{J} \text{ in } \Omega \in \mathbb{R}^d$$

ここで \vec{A}_m はベクトルポテンシャル， \vec{J} はコイル電流密度ベクトル， μ は透磁率， Ω は解析領域である．この偏微分方程式を辺有限要素法で離散化し， \vec{A}_m ， V を未知数としたとき，係数行列は対称半正定値になる．解析領域 Ω において， $\nabla \cdot \vec{J} = 0$ を満たさない \vec{J} を

使用して右辺ベクトルを求めた場合，または数値誤差によって右辺ベクトルが半正定値である係数行列の値域に入らない場合，inconsistent な連立一次方程式が得られる．この場合，CG 法，前処理付き CG 法は収束しない．

そこで，既存の研究では右辺ベクトルを，半正定値な係数行列の値域成分とその直交補空間成分に分離し，右辺ベクトルの値域成分を新規の右辺ベクトルとする．これにより，半正定値な係数行列を持ち，consistent な連立一次方程式になる．この場合には，CG 法，前処理付き CG 法は収束するので，それによって解を得る．

しかしながら，この手法では，半正定値な係数行列の値域成分とその直交補空間成分に分離する補正計算が必要になる．この補正計算をせずに inconsistent な連立一次方程式を直接解ければ，この応用分野 3 の静磁場問題の解法としても役に立つと考えられる．そこで，本研究ではこの係数行列が半正定値かつ inconsistent な連立一次方程式を解くことを考える ([10]) ．

3. 関連研究

3.1 Krylov 部分空間法

Krylov 部分空間を $K_k(A, r_0) = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0)$ とする．ここで x_0 は反復法における初期近似解， $r_0 = b - Ax_0$ は初期残差ベクトルを意味する．大規模疎行列の固有値計算や，大規模疎行列を係数行列とする連立一次方程式の反復解法として，この Krylov 部分空間の中で解を見つける手法が用いられる．本節では Krylov 部分空間法を紹介し，特異系に対しても含め，論じる．

3.1.1 CG 法

CG 法 (共役勾配法, Conjugate Gradient method [22], [41]) は，係数行列が正定値対称である連立一次方程式では収束が保証されており，MINRES 法に比べ，一反復当たりの計算量は少ない．

CG 法のアルゴリズムを付録 1 の **Algorithm 6** に示す．

また係数行列が半正定値であっても，consistent な連立一次方程式であれば CG 法は収束し，初期ベクトルを係数行列の値域に入るようにとれば，最小ノルム解に収束する ([18], [19]) ．

一方で係数行列が半正定値かつ inconsistent な連立一次方程式に対しては CG 法は最小二乗解に必ずしも収束しない．

3.1.2 MINRES 法

文献 [21] より，係数行列 A が対称な場合は，MINRES 法 ([12, 16, 30, 43]) は GMRES 法 ([33, 34]) と数学的に等価であり， $R(A) = R(A^T)$ なので，GMRES 法が破綻なく収束するための必要十分条件を満たすので，MINRES 法も特異系に対し，破綻なく収束する．つまり，MINRES 法は係数行列が特異な場合，consistent, inconsistent に関わらず (最小二乗) 解を与える．不定値行列の場合も解を与える．応用分野 2 のように係数行列が半正定値で consistent な連立一次方程式となる応用例もあるが，一般に偏微分方程式や積分方程式の離散化により得られた特異系では，1.3 節で述べたように，連立一次方程式が inconsistent になる場合がある．対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式が与えられた時，係数行列の核空間または値域がわかれば，右辺ベクトルを係数行列の値域成分に射影することにより，元々 inconsistent な場合でも consistent な連立一次方程式として解くことは可能であるが，一般には行列の核空間または値域はわからない．そこで本研究では consistent, inconsistent に関わらず，対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式の (最小二乗) 解を得るために MINRES 法を用いる．

3.1.3 GMRES 法

GMRES 法 (一般化最小残差法, Generalized Minimal Residual method [33, 34]) は, MINRES 法が係数行列が対称な連立一次方程式の場合のみ適用可能であるのに対し, 非対称の連立一次方程式の場合でも係数が正則であれば, 収束する. MINRES 法同様, Krylov 部分空間において, 最小二乗解を求める手法である.

GMRES 法は, 係数行列 A が非対称な場合も含め, 連立一次方程式 $Ax = b$ に対し, Krylov 部分空間を $K_k(A, r_0) = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0)$ (x_0 は反復法における初期近似解, $r_0 = b - Ax_0$ は初期残差ベクトル) において,

$x_k \in x_0 + K_k(A, r_0)$ s.t. $\|b - Ax_k\|_2 = \min_x \|b - Ax\|_2$ が示すように, 解 x_k を探し, 残差の 2 乗ノルム $\|b - Ax_k\|_2$ を最小化する手法である.

GMRES 法のアルゴリズムを付録 2 の **Algorithm 7** に示す.

GMRES 法は MINRES 法が行列の三重対角化に三項間漸化式である Lanczos 法を用いているのに対し, Hessenberg 行列を用い, 修正 Gram-Schmidt の直交化を行う. 修正 Gram-Schmidt の直交化は, 求めた全ての正規直交基底との直交化を行うため, GMRES 法は MINRES 法より丸め誤差に強い反面, 計算量と必要な記憶容量が多い.

特異系に対し, GMRES 法が任意の右辺ベクトルと任意の初期ベクトルに対して, 破綻することなく, 最小二乗解に収束するために必要十分条件は, 文献 [21] より, $N(A) = N(A^T)$ である.

また文献 [21] より, consistent な連立一次方程式に対しては, $R(A) \cap N(A) = \{0\}$ であれば, 破綻することなく, 連立一次方程式の解に収束する.

3.1.4 MINRES-QLP 法

悪条件の問題に対し, MINRES 法の性能を向上させる方法として, 近年, MINRES-QLP 法 ([5–7]) が提案されている. MINRES-QLP 法は, 特に, MINRES 法において Lanczos 法から得られる三重対角行列の QR 分解に相当する部分について工夫をしている. また対称特異系に対して MINRES 法は最小二乗解を与え, consistent な系については, 解自体の 2 乗ノルムが最小となる解を与えるものの, inconsistent な系については, 必ずしも解自体の 2 乗ノルムが最小となる解を与えない. これに対して, MINRES-QLP は, consistent, inconsistent な系に対して最小二乗解のうち, 解自体の 2 乗ノルムが最小となる解を与える手法である. 悪条件な問題に対しては, MINRES-QLP 法は MINRES 法より精度のよい解を与えることが報告されている.

3.1.5 MR-2 法と Range Restricted MINRES 法

MINRES 法は, 3.1.2 節で述べたように, Krylov 部分空間である, $K_k(A, r_0) = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0)$ (x_0 は反復法における初期近似解, $r_0 = b - Ax_0$ は初期残差ベクトル) の中で, 残差の 2 乗ノルム $\|b - Ax_k\|_2$ を最小とする解 x_k を求める手法である.

これに対し、悪条件の問題を考える場合、Krylov 部分空間 $K_k(A, \mathbf{r}_0) = \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, \dots, A^{k-1}\mathbf{r}_0)$ でなく、初期ベクトルを $\mathbf{0}$ とし、 $K_k(A, A\mathbf{b}) = \text{span}(A\mathbf{b}, A^2\mathbf{b}, \dots, A^k\mathbf{b})$ の中で、残差の 2 乗ノルム $\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}_k\|_2$ を最小とする解 \mathbf{x}_k を求める手法である、MR-2 法 ([17])、Range Restricted Minimal Residual(RRMR) 法 ([4]) が提案されている。提示されている実装アルゴリズムは異なるが、理論上の手法は同じである。

理論上は、対称特異系に対し、解自体の 2 乗ノルムを最小とする最小ノルム解を求めることになっており、それにより、悪条件の問題に対し、MINRES 法の性能を向上させることを狙いとしている。

しかしながら、2.3 節ならびに 7.3 節で扱う静磁場問題の一例である inconsistent な問題、7.4 節で扱う、二つの半正定値行列に対して設定した inconsistent な問題に対しては、MR-2 法は、MINRES 法と比較し、 $\frac{\|A\mathbf{r}\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を小さくできたとはいえ、効果があるとは言えなかった。

また、MR-2 法、RRMR 法も前処理を使うと、係数行列 A が特異の場合、解自体の 2 乗ノルムを最小とする最小ノルム解に必ずしも収束しない。

3.2 前処理

ここでは、前処理の概要と特異系に適用する場合の注意点について報告する。Krylov 部分空間法に対する前処理は、スケーリング前処理や ILU(0) 前処理に代表される直接型前処理と定常反復法等に基づく可変的前処理やマルチグリッド前処理に代表される反復型前処理に大きく分けることができる。Krylov 部分空間法およびその前処理の詳細については [33] を参照されたい。

3.2.1 不完全コレスキー分解

不完全コレスキー分解 ([28]) は、対称行列について、 L を下三角行列としたとき、 LL^T といった形で元の係数行列の近似行列を構築する。下三角行列 L の零、非零パターンは予め決めておく。

不完全コレスキー分解のアルゴリズムを次ページに示す ([41])。なお、行列の下添え字は例えば (i, j) ならばその行列の (i, j) 成分を意味する。また、 L の下三角成分のうち $L_{(i,j)} = 0$ となるよう、予め決めた (i, j) (ただし、 $i > j$) の集合を Z とする。

行列 A が正定値対称でもあっても、任意の Z に対して不完全コレスキー分解が存在する訳ではない。任意の Z に対し不完全コレスキー分解ができるような対称行列のクラスとして、対角要素が正の H 行列が知られている ([41])。

```

1: for  $i = 1, 2, \dots, n$ 
2:   for  $j = 1, 2, \dots, i$ 
3:      $L_{(i,j)} = A_{(i,j)}$ 
4:   end do
5: end do
6: for  $k = 1, 2, \dots, n$ 
7:    $L_{(k,k)} = \sqrt{L_{(k,k)}}$ 
8:    $w = 1/L_{(k,k)}$ 
9:   for  $i = k + 1, k + 2, \dots, n$ 
10:    if  $(i, k) \in Z$  then
11:       $L_{(i,k)} = 0$ 
12:    else
13:       $L_{(i,k)} = L_{(i,k)}w$ 
14:    end do
15:    for  $j = k + 1, k + 2, \dots, n$ 
16:      if  $(j, k) \notin Z$  then
17:        for  $i = j, j + 1, \dots, n$ 
18:          if  $((i, j) \notin Z \wedge (i, k) \notin Z)$  then
19:             $L_{(i,j)} = L_{(i,j)} - L_{(i,k)}L_{(j,k)}$ 
20:          end do
21:        end do
22:      end do

```

3.2.2 内部反復法

前処理として，反復法を用いるが，本論文では特に反復法として定常反復法を用いるものを内部反復法と呼ぶ ([1, 2, 25, 26, 29])．内部反復法が効果があるためには，内部反復法に相当する前処理行列 M が正則かつ元の係数行列 A の近似行列であることが望ましい．

元の係数行列 A が特異行列の場合，対角成分が必ずしも正の値ではなく，特に対角項が 0 である場合，例えば SSOR 法や SOR 法を内部反復法として用いる場合，対角項を 0 以外にする必要がある．

4. MINRES 法

Krylov 部分空間を $K_k(A, r_0) = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0)$ とする．ここで x_0 は反復法における初期近似解， $r_0 = b - Ax_0$ は初期残差ベクトルを意味する．MINRES 法は係数行列が対称な連立一次方程式に対し，

$$x_k \in x_0 + K_k(A, r_0) \quad s.t. \quad \|b - Ax_k\|_2 = \min_x \|b - Ax\|_2$$

となる解 x_k を求める反復法である．

4.1 MINRES 法の実装アルゴリズム

MINRES 法の実装アルゴリズムを Algorithm 1 に示す．

Algorithm 1 : MINRES method (実装版)

```
1:  $v^{(0)} = 0, w^{(0)} = 0, w^{(1)} = 0$ 
2: Choose initial approximate solution  $x^{(0)}$ , compute  $v^{(1)} = b - Ax^{(0)}$ 
3: Set  $\gamma_1 = \|v^{(1)}\|_2$ , set  $\eta = \gamma_1, s_0 = s_1 = 0, c_0 = c_1 = 1$ 
4: for  $j = 1$  until convergence do
5:    $v^{(j)} = v^{(j)} / \gamma_j$ 
6:    $\delta_j = (Av^{(j)}, v^{(j)})$ 
7:    $v^{(j+1)} = Av^{(j)} - \delta_j v^{(j)} - \gamma_j v^{(j-1)}$ 
8:    $\gamma_{j+1} = \|v^{(j+1)}\|_2$ 
9:    $\alpha_0 = c_j \delta_j - c_{j-1} s_j \gamma_j, \alpha_1 = \sqrt{\alpha_0^2 + \gamma_{j+1}^2}$ 
10:   $\alpha_2 = s_j \delta_j + c_{j-1} c_j \gamma_j, \alpha_3 = s_{j-1} \gamma_j$ 
11:   $c_{j+1} = \alpha_0 / \alpha_1, s_{j+1} = \gamma_{j+1} / \alpha_1$ 
12:   $w^{(j+1)} = (v^{(j)} - \alpha_3 w^{(j-1)} - \alpha_2 w^{(j)}) / \alpha_1$ 
13:   $x^{(j)} = x^{(j-1)} + c_{j+1} \eta w^{(j+1)}$ 
14:   $\eta = -s_{j+1} \eta$ 
15:   $r_j = b - Ax^{(j)}$ 
16:  check convergence
17: end do
```

ここで，係数行列が正則な場合または特異行列でも consistent な連立一次方程式の場合，15 行目の残差ベクトル r_j は計算する必要がなく，14 行目で計算する η に対して $|\eta|$ は残差ノルムになるので，これを用いて 16 行目の収束判定を行うことができる．しかしながら，係数行列が特異かつ連立一次方程式が inconsistent な場合， $|\eta|$ は必ずしも残差ノルムにならないので，16 行目の収束判定には，15 行目の残差ベクトルの計算が必要となる．

4.2 MINRES 法の理論的アルゴリズム

4.1 節に記述した **Algorithm 1** は、実装の上では丸め誤差による数値誤差があるものの γ_{j+1} が十分小さい値になることはありえ、その場合の実装を考慮する必要はあり得る。しかしながら、今回の数値実験ではその点は考えず、**Algorithm 1** に従って、実装し、プログラムが破綻することはなかった。 γ_{j+1} が十分小さな値になった場合の実装については今後の課題とする。しかしながら、数値誤差がないとして理論上は **Algorithm 1** の 8 行目の γ_{j+1} が 0 となった場合を考慮し、以下の **Algorithm 1.1** を MINRES 法の理論的アルゴリズムとして示す。なお、 γ_{j+1} が 0 となったとき、MINRES 法は破綻すると呼ぶ。

Algorithm 1.1 : MINRES method (理論版)

```

1:  $\mathbf{v}^{(0)} = \mathbf{0}$ 
2: Choose initial approximate solution  $\mathbf{x}^{(0)}$ , compute  $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$ 
3: Set  $\gamma_1 = \|\mathbf{v}^{(1)}\|_2$ , set  $\eta = \gamma_1$ ,  $s_0 = s_1 = 0$ ,  $c_0 = c_1 = 1$ 
4: for  $j = 1$  until convergence do
5:      $\mathbf{v}^{(j)} = \mathbf{v}^{(j)} / \gamma_j$ 
6:      $\delta_j = (A\mathbf{v}^{(j)}, \mathbf{v}^{(j)})$ 
7:      $\mathbf{v}^{(j+1)} = A\mathbf{v}^{(j)} - \delta_j\mathbf{v}^{(j)} - \gamma_j\mathbf{v}^{(j-1)}$ 
8:      $\gamma_{j+1} = \|\mathbf{v}^{(j+1)}\|_2$ , If  $\gamma_{j+1} = 0$ , go to line 11
9:     Form the approximate solution  $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_0 + [\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(j)}]\mathbf{y}_j$ 
        where  $\mathbf{y} = \mathbf{y}_j$  minimizes  $\|\mathbf{r}_j\|_2 = \|\gamma_1\mathbf{e}_1 - \bar{T}_j\mathbf{y}\|_2$ . If  $A\mathbf{r}_j = \mathbf{0}$ , goto 11
10: end do
11:  $k := j$ 
12: Form the approximate solution  $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + [\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(k)}]\mathbf{y}_k$ 
    where  $\mathbf{y} = \mathbf{y}_k$  minimizes  $\|\mathbf{r}_k\|_2 = \|\gamma_1\mathbf{e}_1 - \bar{T}_k\mathbf{y}\|_2$ .

```

ここで、行列 $\bar{T}_k \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$ は三重対角行列で、 (i, i) ($1 \leq i \leq k$) 成分が δ_i 、 $(i, i+1)$ ($1 \leq i \leq k$) 成分ならびに $(i+1, i)$ ($1 \leq i \leq k-1$) 成分が γ_i である。また、 $\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^{(k+1)}$ である。

5. 前処理付き MINRES 法

文献 [12] では係数行列が正則な連立一次方程式に MINRES 法を適用する場合，以下の 2 つの理由から前処理行列 M は正定値対称でなければならないとしている．

- 前処理付き MINRES 法は，行列 M^{-1} に関する残差ノルムを最小化しているため， M^{-1} に関するノルムを定義できなければならない．
- 正定値対称行列 M はコレスキー分解 LL^T (L^T は L の転置行列を意味する) できるので，両側前処理を用いることにより，前処理後の係数行列の対称性が保たれ，MINRES 法が直接適用可能である．

しかしながら，係数行列が特異な場合についての前処理の仕方については文献 [12] では議論がされていない．そこで以下 5.1 節では実対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式に MINRES 法を適用する場合の前処理の仕方について議論し，inconsistent な連立一次方程式の場合，左前処理よりも右前処理の方が問題の等価性を保ちやすいことを示す．また 5.2 節では，5.1 節での議論を踏まえ，右前処理 MINRES 法の定式化を行う．

5.1 右前処理と左前処理

MINRES 法が Krylov 部分空間において残差の 2 乗ノルムを最小化する解を求める手法であることは，4 章で述べた．文献 [20] に残差の 2 乗ノルムを最小化する解を見つける問題に関して，行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ が与えられたとき，行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を右前処理とした場合については定理 5.1 が示されている．

定理 5.1 ([20], 2010) (右前処理の場合) 行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ に対して，

$$(5.1) \quad \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2 = \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m} \|\mathbf{b} - AB\mathbf{z}\|_2 \text{ for } \forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$$

の必要十分条件は $R(A) = R(AB)$ である．

一方，行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を左前処理とした場合については定理 5.2 が示されている．

定理 5.2 ([20], 2010) (左前処理の場合) 行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ に対して，

$$\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}^*\|_2 = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2 \Leftrightarrow \|B\mathbf{b} - BA\mathbf{x}^*\|_2 = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|B\mathbf{b} - BA\mathbf{x}\|_2 \text{ for } \forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$$

の必要十分条件は $R(A) = R(B^T BA)$ である．

ここではさらに特異な係数行列を持つ連立一次方程式が consistent である場合，定理 5.1，定理 5.2 それぞれが示す右前処理および左前処理した際の問題の等価性を保つための必要十分条件が緩和できるかどうかを検証する．ただし， $N(B)$ は行列 B の核空間を意味する．

左前処理の場合については，以下の定理 5.3 が示すように，連立一次方程式が consistent なとき，問題の等価性を保つための必要十分条件を緩めることができる．

定理 5.3 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{l \times m}$, $x \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$ とする．

$b \in R(A)$ ならば， $BAx = Bb \Rightarrow Ax = b$ の必要十分条件は $R(A) \cap N(B) = \{\mathbf{0}\}$ である．
($[BAx = Bb \Leftarrow Ax = b]$ は常に成立する．)

証明 $b \in R(A)$ ならば $r = b - Ax \in R(A)$ が成立する．したがって，

$Bb - BAx = Br = 0 \iff r \in R(A) \cap N(B)$ が成り立つ．よって $Br = \mathbf{0}$ ならば $r = b - Ax = \mathbf{0}$ が成立するための必要十分条件は $R(A) \cap N(B) = \{\mathbf{0}\}$ である．

定理 5.3 が示す，consistent な連立一次方程式に対して左前処理を適用した場合に，問題の等価性を保つ必要十分条件を満たす特殊な場合として，以下の注意 1，注意 2，注意 3 を示す．

注意 1 $\text{rank}(B) = m (\leq l) \iff N(B) = \{\mathbf{0}\} \implies R(A) \cap N(B) = \{\mathbf{0}\}$

注意 2 特に $B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ が正則行列ならば $N(B) = \{\mathbf{0}\}$ であるので， $R(A) \cap N(B) = \{\mathbf{0}\}$ が成立する．

線形代数的にも下記が成立する．

注意 3 $R(A) = R(B^T BA) \implies R(A) \cap N(B) = \{\mathbf{0}\}$

証明 $R(A) = R(B^T BA) \subseteq R(B^T)$, $N(B) = R(B^T)^\perp$

したがって，確かに定理 5.3 の consistent な場合の条件は，定理 5.2 の inconsistent な場合の条件よりも緩くなっている．

次に，定理 5.1 が示す，右前処理した場合の問題の等価性を保つ必要十分条件が，連立一次方程式が consistent な場合に緩和できるか検証する．そこで，以下の定理 5.4 が成立する．

定理 5.4 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times l}$, $b \in \mathbb{R}^m$ とする．

$b \in R(A)$ ならば，
(5.2) $\exists x \in \mathbb{R}^n; Ax = b \Rightarrow \exists z \in \mathbb{R}^l; ABz = b$

の必要十分条件は $R(A) = R(AB)$ である．($[\exists x \in \mathbb{R}^n; Ax = b \Leftarrow \exists z \in \mathbb{R}^l; ABz = b]$ は常に成立する．)

証明 $R(A) = R(AB)$ が十分条件になることをまず証明する． $R(A) \equiv \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\}$, $R(AB) \equiv \{ABz \mid z \in \mathbb{R}^l\}$ であるので， $R(A) = R(AB)$ であるための必要十分条件は， $\{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\} = \{ABz \mid z \in \mathbb{R}^l\}$ である．

$\mathbf{b} \in R(A)$ より, $\exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow \exists \mathbf{z} \in \mathbb{R}^l; AB\mathbf{z} = \mathbf{b}$ が成立する.

次に $R(A) = R(AB)$ が必要条件になることを背理法で証明する. $R(A) \neq R(AB)$ とすると $R(A) \supset R(AB)$ であるから $\exists \mathbf{b} \in R(A) \setminus R(AB)$ である.

$\exists \mathbf{b} \in R(A) \setminus R(AB) \Leftrightarrow \exists \mathbf{b}, \exists \mathbf{x}; \mathbf{b} = A\mathbf{x}, \mathbf{b} \neq AB\mathbf{z} \text{ for all } \mathbf{z} \in \mathbb{R}^l$ が成立する.

したがって, $\exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow \exists \mathbf{z} \in \mathbb{R}^l; AB\mathbf{z} = \mathbf{b}$ が成立しない $\mathbf{b} \in R(A)$ が存在する. よって $R(A) = R(AB)$ が必要条件であることが示された.

定理 5.4 より, 定理 5.1 が示す, 右前処理した場合の問題の等価性を保つ必要十分条件は, 連立一次方程式が consistent な場合でも緩和できず, 同様の必要十分条件であることが示された.

定理 5.4 が示す, consistent な連立一次方程式に対して右前処理を適用した場合に, 問題の等価性を保つ必要十分条件を満たす特殊な場合として, 以下の注意 4 を示す.

注意 4 行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が正則ならば, $R(A) = R(AB)$ が成立する.

証明 $R(A) = \{A\mathbf{x} | \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} = \{ABB^{-1}\mathbf{x} | \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} = \{AB\mathbf{z} | \mathbf{z} = B^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} = \{AB\mathbf{z} | \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n\} = R(AB)$

したがって, 行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が正則ならば, 行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ に対して, 定理 5.4 から式 (5.2) が成立する.

以上の議論から特異な係数行列をもつ連立一次方程式が consistent な場合, 行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は特異行列, 行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は正則行列としたとき,

$$(5.3) \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow B A \mathbf{x} = B \mathbf{b} \Leftrightarrow AB\mathbf{z} = \mathbf{b}, (\mathbf{x} = B\mathbf{z})$$

が成立する. 式 (5.3) が意味することは, 特異な係数行列をもつ, consistent な連立一次方程式に対して左前処理, 右前処理をしても前処理行列が正則であるという条件のみで問題の等価性が保たれることである.

次に特異な係数行列をもつ連立一次方程式が inconsistent な場合について議論する.

A が特異行列で B が正則行列の場合,

- $R(A) = R(AB)$ は成立するが,
- $R(A) = R(B^T B A)$ は必ずしも成立しない.

さて, 右前処理の場合は, 定理 5.1(および定理 5.4) から, 特異行列 A を係数行列とする連立一次方程式に対して, B が正則行列でありさえすれば, 行列 B を前処理行列とした右前処理を用いれば元の問題 (1.1) または (1.2) の等価性は保つことができる.

一方で左前処理の場合は, 元の連立一次方程式の係数行列 A が特異で inconsistent な場合 B が正則行列という条件だけでは, $R(A) = R(B^T B A)$ は必ずしも成立しないため, 問題の等価性が保たれるとは限らない.

本節の議論は、特異系に対して前処理付き GMRES 法を適用する場合、右前処理の際は前処理行列が正則という条件のみで問題の等価性を保つことを示している。

5.2 右前処理 MINRES 法

M を対称正定値行列とし、元の最小二乗問題 $\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2$ に対し、右前処理した特異な係数行列をもつ最小二乗問題

$$(5.4) \quad \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - AM^{-1}\mathbf{z}\|_2$$

を考える。 M^{-1} は正定値行列であるので、正則行列である。したがって $R(A) = R(AM^{-1})$ を満たすので $B = M^{-1}$ として、式 (5.1) および式 (5.2) が成立し、式 (5.4) と式 (1.2) は等価である。

しかしながら、式 (5.4) において行列 A と M がそれぞれ対称であっても、係数行列 AM^{-1} は対称とは限らない。このため、(特異な係数行列をもつ最小二乗問題)(5.4) に \mathbb{R}^n の標準内積を使った通常の MINRES 法は適用できない。

そこで式 (5.4) に MINRES 法を適用して、右前処理 MINRES 法のアルゴリズムを導出するために以下のポイントを利用する。ただし、

定義 5.5 $(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{M^{-1}} = \mathbf{x}^T M^{-1} \mathbf{y}$

と定義する。行列 M が対称正定値なため、上記は内積の条件を満たしている。ここで A は対称なので $(AM^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{y})_{M^{-1}} = (\mathbf{x}, AM^{-1}\mathbf{y})_{M^{-1}}$ より、右前処理した係数行列 AM^{-1} は行列 M^{-1} に関する内積について自己随伴なので、行列 M^{-1} に関する内積空間における MINRES 法を最小二乗問題 (5.4) に適用することが可能である。このようにして導出した右前処理 MINRES 法のアルゴリズムの概要は **Algorithm 2** のようになる。

Algorithm 2 : Right preconditioned MINRES (essence)

1: Find

$$\mathbf{z}_k \in M\mathbf{x}_0 + K_k(AM^{-1}, \mathbf{r}_0) \text{ s.t. } \|\mathbf{b} - AM^{-1}\mathbf{z}_k\|_{M^{-1}} = \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - AM^{-1}\mathbf{z}\|_{M^{-1}}$$

2: Compute the solution $\mathbf{x}_k = M^{-1}\mathbf{z}_k$

右前処理 MINRES 法では M^{-1} に関するノルムでの残差ノルムを最小化する。したがって、inconsistent な場合は一般に元の残差の 2 ノルム最小の解とは異なる解を与える。さらに、**Algorithm 3** に定式化した右前処理 MINRES 法のアルゴリズムの実装アルゴリズムを示す。 M は前処理行列を意味する。

Algorithm 3 に示した右前処理 MINRES 法のアルゴリズムは、実装の上では丸め誤差による数値誤差がものの **Algorithm 3** の 10 行目の γ_{j+1} が十分小さい値になることはあ

Algorithm 3 : Right preconditioned MINRES method (実装版)

1. $\mathbf{v}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(1)} = \mathbf{0}$
 - 2: Choose initial approximate solution $\mathbf{x}^{(0)}$, compute $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$
 - 3: $\mathbf{u}^{(1)} = M^{-1}\mathbf{v}^{(1)}$
 - 4: Set $\gamma_1 = \sqrt{(\mathbf{v}^{(1)}, \mathbf{u}^{(1)})}$, set $\eta = \gamma_1, s_0 = s_1 = 0, c_0 = c_1 = 1$
 - 5: for $j = 1$ until convergence do
 - 6: $\mathbf{v}^{(j)} := \mathbf{v}^{(j)}/\gamma_j, \mathbf{u}^{(j)} := \mathbf{u}^{(j)}/\gamma_j$
 - 7: $\delta_j = (\mathbf{u}^{(j)}, A\mathbf{u}^{(j)})$
 - 8: $\mathbf{v}^{(j+1)} = A\mathbf{u}^{(j)} - \delta_j\mathbf{v}^{(j)} - \gamma_j\mathbf{v}^{(j-1)}$
 - 9: $\mathbf{u}^{(j+1)} = M^{-1}\mathbf{v}^{(j+1)}$
 - 10: $\gamma_{j+1} = \sqrt{(\mathbf{v}^{(j+1)}, \mathbf{u}^{(j+1)})}$
 - 11: $\alpha_0 = c_j\delta_j - c_{j-1}s_j\gamma_j, \alpha_1 = \sqrt{\alpha_0^2 + \gamma_{j+1}^2}$
 - 12: $\alpha_2 = s_j\delta_j + c_{j-1}c_j\gamma_j, \alpha_3 = s_{j-1}\gamma_j$
 - 13: $c_{j+1} = \alpha_0/\alpha_1, s_{j+1} = \gamma_{j+1}/\alpha_1$
 - 14: $\mathbf{w}^{(j+1)} = (\mathbf{u}^{(j)} - \alpha_3\mathbf{w}^{(j-1)} - \alpha_2\mathbf{w}^{(j)})/\alpha_1$
 - 15: $\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{x}^{(j-1)} + c_{j+1}\eta\mathbf{w}^{(j+1)}$
 - 16: $\eta = -s_{j+1}\eta$
 - 17: $\mathbf{r}_j = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(j)}$
 - 18: check convergence
 - 19: end do
-

りえ、その場合の実装を考慮する必要はあり得る。しかしながら、今回の数値実験ではその点は考えず、Algorithm 3 に従って、実装し、プログラムが破綻することはなかった。 γ_{j+1} が十分小さな値になった場合の実装については今後の課題とする。しかしながら、数値誤差がないとして理論上は Algorithm 3 の 8 行目の γ_{j+1} が 0 となった場合を考慮し、以下の Algorithm 3.1 を右前処理 MINRES 法の理論的アルゴリズムとして示す。なお、 γ_{j+1} が 0 となったとき、右前処理 MINRES 法は破綻すると呼ぶ。

ここで、行列 $\bar{T}_k \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$ は三重対角行列で、 $(i, i)(1 \leq i \leq k)$ 成分が δ_i 、 $(i, i+1)(1 \leq i \leq k)$ 成分ならびに $(i+1, i)(1 \leq i \leq k-1)$ 成分が γ_i である。また、 $\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^{(k+1)}$ である。

ここで、元の連立一次方程式の残差ベクトル $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$ の右前処理 MINRES 法における挙動を解析する。そのために、まず右前処理 MINRES 法は、係数行列が対称である連立一次方程式 (1.1) に適用した場合、係数行列が正則、特異に関わらず、任意の右辺ベクトル、初期ベクトルに対して、前処理行列を M としたとき、 M^{-1} に関するノルムでの残差ノルムを最小化する解に破綻することなく収束するという定理を示す。

さらにその定理と重み付き最小二乗問題の一般論 (重み付き最小二乗問題と重み付き正規方程式が等価であること) から、右前処理 MINRES 法の残差ノルムの挙動について論

Algorithm 3.1 : Right preconditioned MINRES method (理論版)

1. $\mathbf{v}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(1)} = \mathbf{0}$
2: Choose initial approximate solution $\mathbf{x}^{(0)}$, compute $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$
3: $\mathbf{u}^{(1)} = M^{-1}\mathbf{v}^{(1)}$
4: Set $\gamma_1 = \sqrt{(\mathbf{v}^{(1)}, \mathbf{u}^{(1)})}$, set $\eta = \gamma_1, s_0 = s_1 = 0, c_0 = c_1 = 1$
5: for $j = 1$ until convergence do
6: $\mathbf{v}^{(j)} := \mathbf{v}^{(j)}/\gamma_j, \mathbf{u}^{(j)} := \mathbf{u}^{(j)}/\gamma_j$
7: $\delta_j = (\mathbf{u}^{(j)}, A\mathbf{u}^{(j)})$
8: $\mathbf{v}^{(j+1)} = A\mathbf{u}^{(j)} - \delta_j\mathbf{v}^{(j)} - \gamma_j\mathbf{v}^{(j-1)}$
9: $\mathbf{u}^{(j+1)} = M^{-1}\mathbf{v}^{(j+1)}$
10: $\gamma_{j+1} = \sqrt{(\mathbf{v}^{(j+1)}, \mathbf{u}^{(j+1)})}$, If $\gamma_{j+1} = 0$, go to line 13
11: Form the approximate solution $\mathbf{z}_j = \mathbf{z}_0 + [\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(j)}]\mathbf{y}_j$
 $\mathbf{x}_j = M^{-1}\mathbf{z}_j = M^{-1}\mathbf{z}_0 + M^{-1}[\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(j)}]\mathbf{y}_j$
 where $\mathbf{y} = \mathbf{y}_j$ minimizes $\|\mathbf{r}_j\|_{M^{-1}} = \|\gamma_1\mathbf{e}_1 - \bar{T}_j\mathbf{y}\|_2$, If $AM^{-1}\mathbf{r}_j = \mathbf{0}$, goto 13
12: end do
13: $k := j$
14: Form the approximate solution $\mathbf{z}_k = \mathbf{z}_0 + [\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(k)}]\mathbf{y}_k$
 $\mathbf{x}_k = M^{-1}\mathbf{z}_k = M^{-1}\mathbf{z}_0 + M^{-1}[\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(k)}]\mathbf{y}_k$ where $\mathbf{y} = \mathbf{y}_k$ minimizes $\|\mathbf{r}_k\|_2 = \|\gamma_1\mathbf{e}_1 - \bar{T}_k\mathbf{y}\|_2$

じる .

5.3 右前処理 MINRES 法の収束解析

Algorithm 2 , Algorithm 3.1 で示した右前処理 MINRES 法を係数行列が正則 , 特異いずれの場合も含めて係数行列が対称な連立一次方程式に適用した場合に以下の定理が成立する .

定理 5.6 右前処理 MINRES 法は , 正則な系のみならず , 特異系に対しても , 任意の $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, 任意の初期ベクトル $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n (= M^{-1}\mathbf{z}^{(0)})$ に対し , 破綻することなく

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_{M^{-1}} = \min_{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - AM^{-1}\mathbf{z}\|_{M^{-1}}$$

の解 $\mathbf{x} = M^{-1}\mathbf{z}$ に収束する .

また $\text{rank} A = \dim R(A) = r > 0$ としたとき , 右前処理 MINRES 法が収束に要する反復数は , consistent な系 ($\mathbf{b} \in R(A)$) の場合は最大でも r , inconsistent な系 ($\mathbf{b} \notin R(A)$) の場合は最大でも $\min(r+1, n)$ である . ここで行列 M は **Algorithm 2 , Algorithm 3** における正定値対称行列 M である .

証明

$\text{rank}A = \dim R(A) = r > 0$ とし ,

(5.5) $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_r : R(AM^{-1}) = R(A)$ における行列 M^{-1} に関する内積空間での直交基底

(5.6) $\mathbf{q}_{r+1}, \dots, \mathbf{q}_n : R(AM^{-1})^{\perp_{M^{-1}}} = R(A)^{\perp_{M^{-1}}}$ における行列 M^{-1} に関する内積空間での直交基底

とする . ここで , $R(A)^{\perp_{M^{-1}}}$ は $R(A)$ の行列 M^{-1} に関する内積空間での直交補空間を意味する . そこで , 行列 Q_1, Q_2, Q を次のように定義する .

$$\begin{aligned} Q_1 &:= [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_r] \in \mathbb{R}^{n \times r} \\ Q_2 &:= [\mathbf{q}_{r+1}, \dots, \mathbf{q}_n] \in \mathbb{R}^{n \times (n-r)} \\ Q &:= [Q_1, Q_2] \in \mathbb{R}^{n \times n} \end{aligned}$$

(5.5) , (5.6) から , 行列 $I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を単位行列としたとき ,

$$(5.7) \quad Q^T M^{-1} Q = I_n$$

が成立する . 従って , (5.7) を使えば , $(M^{-\frac{1}{2}} Q)^T M^{-\frac{1}{2}} Q = M^{-\frac{1}{2}} Q (M^{-\frac{1}{2}} Q)^T$ であることも利用し ,

$$\begin{aligned} I_n &= Q^T M^{-1} Q \\ &= (M^{-\frac{1}{2}} Q)^T M^{-\frac{1}{2}} Q \\ &= M^{-\frac{1}{2}} Q (M^{-\frac{1}{2}} Q)^T \\ &= M^{-\frac{1}{2}} Q Q^T M^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

となり ,

$$(5.8) \quad Q Q^T = M$$

が成立する . 行列 $\hat{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を $\hat{A} := Q^T M^{-1} A M^{-1} Q$ と定義すると , $Q_2^T M^{-1} A = 0$ なので ,

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} Q_1^T M^{-1} A M^{-1} Q_1 & Q_1^T M^{-1} A M^{-1} Q_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

行列 A, M が対称行列であることから行列 \hat{A} は対称行列になるため , $Q_1^T M^{-1} A M^{-1} Q_2 = 0$ になる . したがって , 行列 $A_{11} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ を $A_{11} := Q_1^T M^{-1} A M^{-1} Q_1$ と定義すると ,

$$(5.9) \quad \hat{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

となる . 行列 Q, M が正則であることから , $\text{rank}(A) = r = \text{rank}(\hat{A}) = \text{rank}(A_{11})$ であることから , 行列 A_{11} は正則な対称行列になる .

そこで , 本定理を証明するにあたり , 文献 [21] での GMRES 法を特異系も含めた系に適用した場合の挙動解析にあたり , GMRES 法を $R(A)$ 成分と $R(A)^{\perp}$ 成分に分解している

ように，右前処理 MINRES 法を $R(A)$ 成分と $R(A)^{\perp_{M^{-1}}}$ 成分に分解したアルゴリズムを考える．

まず，残差ベクトル $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x} = \mathbf{b} - AM^{-1}\mathbf{z}$ ($\mathbf{x} = M^{-1}\mathbf{z}$) に対して， $\|\mathbf{r}\|_{M^{-1}}$ を分析するため， $\tilde{\mathbf{r}} := Q^T M^{-1} \mathbf{r}$ を定義して， $\tilde{\mathbf{r}}$ を使う．そうすると，(5.8)，(5.9) を利用すると，

$$\begin{aligned}
 (5.10) \quad \tilde{\mathbf{r}} &= Q^T M^{-1} \mathbf{r} \\
 &= Q^T M^{-1} \mathbf{b} - Q^T M^{-1} A M^{-1} (Q Q^T M^{-1}) M \mathbf{x} \\
 &= Q^T M^{-1} \mathbf{b} - \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} Q^T M^{-1} \mathbf{z} \\
 &= \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 - A_{11} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

となる．ただし，

$$Q^T M^{-1} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{bmatrix}$$

とし， $\mathbf{z}_1 = Q_1^T M^{-1} \mathbf{z}$ としている．

一方，(5.8) から，

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathbf{r}} &= Q^T M^{-1} \mathbf{r} \\
 &= Q^{-1} \mathbf{r}
 \end{aligned}$$

であることから $\mathbf{r} = Q \tilde{\mathbf{r}}$ となる．

したがって，(5.7)，(5.8) を利用すると，

$$\begin{aligned}
 \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_{M^{-1}}^2 &= \|\mathbf{b} - A M^{-1} \mathbf{z}\|_{M^{-1}}^2 \\
 &= \|\mathbf{r}\|_{M^{-1}}^2 \\
 &= \mathbf{r}^T M^{-1} \mathbf{r} \\
 &= \tilde{\mathbf{r}}^T Q^T M^{-1} Q \tilde{\mathbf{r}} \\
 &= \tilde{\mathbf{r}}^T \tilde{\mathbf{r}} \\
 &= \|\tilde{\mathbf{r}}\|_2^2
 \end{aligned}$$

となる．よって，(5.10) より，

$$(5.11) \quad \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_{M^{-1}}^2 = \|\mathbf{b} - A M^{-1} \mathbf{z}\|_{M^{-1}}^2 = \|\mathbf{r}\|_{M^{-1}}^2 = \|\tilde{\mathbf{r}}\|_2^2 = \|\mathbf{b}_1 - A_{11} \mathbf{z}_1\|_2^2 + \|\mathbf{b}_2\|_2^2$$

となる．

ここで右前処理 MINRES 法は，**Algorithm 2** の 1 が示すように \mathbf{z}_k を求めた上で，**Algorithm 2** の 2 が示すように $\mathbf{x}_k = M^{-1} \mathbf{z}_k$ を求める手法である．

(5.11) を踏まえて，係数行列 A が特異の場合を考慮し，**Algorithm 3.1** で示した右前処理 MINRES 法を， $R(AM^{-1})$ 成分と $R(AM^{-1})^{\perp_{M^{-1}}}$ 成分に分解した右前処理 MINRES 法 (以後分解版右前処理 MINRES 法と呼ぶ) のアルゴリズムを **Algoritm 4** に示す．

Algorithm 4 : Decomposed Right preconditioned MINRES method

$R(AM^{-1}) = R(A)$ 成分	$R(AM^{-1})^{\perp_{M^{-1}}} = R(A)^{\perp_{M^{-1}}}$ 成分
1. $\mathbf{v}_1^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}_1^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}_1^{(1)} = \mathbf{0}$	$\mathbf{v}_2^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}_2^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}_2^{(1)} = \mathbf{0}$
2. $\mathbf{b}_1 = Q_1^T M^{-1} \mathbf{b}$	$\mathbf{b}_2 = Q_2^T M^{-1} \mathbf{b}$
3: Choose initial approximate solution $\mathbf{z}^{(0)} (= M\mathbf{x}^{(0)})$	
4: Compute $\mathbf{z}_1^{(0)} = Q_1^T M^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$	$\mathbf{z}_2^{(0)} = Q_2^T M^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$
5: $\mathbf{v}_1^{(1)} = \mathbf{b}_1 - A_{11} \mathbf{z}_1^{(0)}$	$\mathbf{v}_2^{(1)} = \mathbf{b}_2$
6: Set $\gamma_1 = \ \mathbf{v}^{(1)}\ _{M^{-1}} = \ Q^T M^{-1} \mathbf{v}^{(1)}\ _2 = (\ \mathbf{v}_1^{(1)}\ _2^2 + \ \mathbf{v}_2^{(1)}\ _2^2)^{\frac{1}{2}}$	
7: Set $\eta = \gamma_1, s_0 = s_1 = 0, c_0 = c_1 = 1$	
8: for $j = 1$ until convergence do	
9: $\mathbf{v}_1^{(j)} := \mathbf{v}_1^{(j)} / \gamma_j$	$\mathbf{v}_2^{(j)} := \mathbf{v}_2^{(j)} / \gamma_j$
10: $\delta_j = (M^{-1} \mathbf{v}^{(j)}, AM^{-1} \mathbf{v}^{(j)}) = (\mathbf{v}_1^{(j)}, A_{11} \mathbf{v}_1^{(j)})$	
11: $\mathbf{v}_1^{(j+1)} = A_{11} \mathbf{v}_1^{(j)} - \delta_j \mathbf{v}_1^{(j)} - \gamma_j \mathbf{v}_1^{(j-1)}$	$\mathbf{v}_2^{(j+1)} = -\delta_j \mathbf{v}_2^{(j)} - \gamma_j \mathbf{v}_2^{(j-1)}$
12: $\gamma_{j+1} = \ \mathbf{v}^{(j+1)}\ _{M^{-1}} = (\ \mathbf{v}_1^{(j+1)}\ _2^2 + \ \mathbf{v}_2^{(j+1)}\ _2^2)^{\frac{1}{2}}$, If $\gamma_{j+1} = 0$, go to line 15	
13 : Form the approximate solution	
$\mathbf{z}_1^{(j)} = \mathbf{z}_1^{(0)} + [\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(j)}] \mathbf{y}_j$	$\mathbf{z}_2^{(j)} = \mathbf{z}_2^{(0)} + [\mathbf{v}_2^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_2^{(j)}] \mathbf{y}_j$
where $\mathbf{y} = \mathbf{y}_j$ minimizes $\ \mathbf{r}_1^{(j)}\ _2 = \ \gamma_1 \mathbf{v}_1^{(1)} - A_{11} [\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(j)}] \mathbf{y}_j\ _2$	
$= \ \mathbf{b}_1 - A_{11} \mathbf{z}_1^{(0)} - A_{11} [\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(j)}] \mathbf{y}_j\ _2$	
$= \ \mathbf{b}_1 - A_{11} \mathbf{z}_1^{(j)}\ _2$, If $\ \mathbf{r}_1^{(j)}\ _2 = 0$, go to line 15	
14: end do	
15: $k := j$	
16: Form the approximate solution	
$\mathbf{z}_1^{(k)} = \mathbf{z}_1^{(0)} + [\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(k)}] \mathbf{y}_k$	$\mathbf{z}_2^{(k)} = \mathbf{z}_2^{(0)} + [\mathbf{v}_2^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_2^{(k)}] \mathbf{y}_k$
where $\mathbf{y} = \mathbf{y}_k$ minimizes $\ \mathbf{r}_1^{(k)}\ _2 = \ \gamma_1 \mathbf{v}_1^{(1)} - A_{11} [\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(k)}] \mathbf{y}_k\ _2$	
$= \ \mathbf{b}_1 - A_{11} \mathbf{z}_1^{(0)} - A_{11} [\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(k)}] \mathbf{y}_k\ _2$	
$= \ \mathbf{b}_1 - A_{11} \mathbf{z}_1^{(k)}\ _2$	
17: $\mathbf{x}^{(k)} = M^{-1}(Q_1 \mathbf{z}_1^{(k)} + Q_2 \mathbf{z}_2^{(k)})$	

ここで注意点としては分解しているのは解 \mathbf{x} を求める部分ではなく, $\mathbf{z} = M\mathbf{x}$ を求めているところであり, 17 行目は $R(AM^{-1})$ 成分と $R(AM^{-1})^{\perp_{M^{-1}}}$ 成分には分解していない.

正則な系, 特異で consistent な系では $\mathbf{b}_2 = \mathbf{0}$ なので, **Algorithm 4** で示した分解版右前処理 MINRES 法の $R(AM^{-1})$ 成分は, A_{11} が正則な対称行列であるため, $A_{11} \mathbf{z}_1 = \mathbf{b}_1$ に適用した MINRES 法と等価である. 係数行列が対称な場合には MINRES 法と GMRES 法は等価であることと, 文献 [34] が論じている GMRES 法が係数行列が正則な連立一次方程式に適用された際に破綻することなく最小二乗解に収束することを示す議論から, MINRES 法は対称正則な系に破綻することなく最小二乗解に収束する. したがって, **Algorithm 4** で示した分解版右前処理 MINRES 法の $R(AM^{-1})$ 成分についても特異で

consistent な系に対して，以下が成立する．

分解版右前処理 MINRES 法の $R(AM^{-1})$ 成分での $z_1^{(j)}$ が $\min_{z_1 \in \mathbb{R}^r} \|b_1 - A_{11}z_1\|_2$ の解 $\Leftrightarrow \gamma_{j+1} = 0$

上記は，MINRES 法が係数行列が正則かつ対称な連立一次方程式に適用された場合，破綻することなく最小二乗解に収束することと同じことである．

対称行列 $A_{11} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ が正則であることならびに $b_1 \in \mathbb{R}^r$ であることから，分解版右前処理 MINRES 法の $R(A) = R(AM^{-1})$ 成分が

$$\min_{z_1 \in \mathbb{R}^r} \|b_1 - A_{11}z_1\|_2$$

の解に収束するのに要する反復数は最大でも $r (= \text{rank} A)$ である．

行列 A_{11} は正則なので，分解版右前処理 MINRES 法の $R(A) = R(AM^{-1})$ 成分での $z_1^{(j)}$ が

$$\min_{z_1 \in \mathbb{R}^r} \|b_1 - A_{11}z_1\|_2$$

の解であれば， $\|b_1 - A_{11}z_1^{(j)}\|_2 = 0$ が成立する．

したがって，(5.11) より，右前処理 MINRES 法は特異で consistent な系ならびに正則な系に対して，任意の $b \in \mathbb{R}^n$ ，任意の初期ベクトル $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n (= M^{-1}z^{(0)})$ に対し，破綻することなく

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_{M^{-1}} = \min_{z \in \mathbb{R}^n} \|b - AM^{-1}z\|_{M^{-1}}$$

の解 $x = M^{-1}z$ に収束し，収束に要する反復数は最大でも $r (= \text{rank} A)$ である．

次に特異で inconsistent な系に対して，本定理を証明する．そのために **Algorithm 4** に示した分解版右前処理 MINRES 法について，以下の 4 点を証明する．

- (項目 1) $\gamma_{j+1} \neq 0$ である限り，分解版右前処理 MINRES 法は破綻しない．
- (項目 2) $\gamma_{j+1} = 0$ ならば， $R(A) = R(AM^{-1})$ 成分の j ステップ目で得られている $z_1^{(j)}$ は， $A_{11}z_1 = b_1$ の解になる．
- (項目 3) $\gamma_{j+1} \neq 0$ である限り， $\text{rank} V_1^{(j+1)} \geq j$ ($V_1^{(j+1)} = [v_1^{(1)}, \dots, v_1^{(j+1)}] \in \mathbb{R}^{r \times (j+1)}$) である．
- (項目 4) $j \leq n$ までに必ず $\gamma_{j+1} = 0$ になる．

まず，(項目 1) を証明する．**Algorithm 4** の 12 行目で計算する γ_{j+1} が 0 でなければ，次のステップでの 9 行目の計算は 0 割り計算でなく，分解版右前処理 MINRES 法は破綻しない．

また実装の上でも **Algorithm 3** で示した右前処理 MINRES 法の実装版においても， γ_{j+1} が 0 でなければ，11 行目で計算される $\alpha_1 = \sqrt{\alpha_0^2 + \gamma_{j+1}^2}$ は正の値になり，**Algorithm 3** の 13 行目，14 行目での QR 分解の対角項 α_1 が正の値であるために，0 割が起きないので，右前処理 MINRES 法の実装版も破綻しない．

次に、(項目 2) を証明する．

まず $V_1^{(j)} = [\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(j)}] \in \mathbb{R}^{r \times j}$, $V_2^{(j)} = [\mathbf{v}_2^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_2^{(j)}] \in \mathbb{R}^{(n-r) \times j}$ と 2 つの行列を定義する．また、ここで、行列 $T_j \in \mathbb{R}^{j \times j}$ は対称三重対角行列で、 (i, i) ($1 \leq i \leq j$) 成分が δ_i , $(i, i+1)$ ($1 \leq i \leq j-1$) 成分ならびに $(i+1, i)$ ($1 \leq i \leq j-1$) 成分が γ_{i+1} とする． $\gamma_{j+1} = 0$ であれば、

$$(5.12) \quad A_{11} V_1^{(j)} = V_1^{(j)} T_j$$

が成立する．まず $\gamma_{j+1} = 0$ であれば、以下の 2 つの事項を証明する．

(項目 a) $\text{rank} V_1^{(j)} = j - 1$

(項目 b) 行列 T_j は特異行列である．

まず、(項目 b) を証明する． $\gamma_{j+1} = 0$ であるので、Algorithm 4 に示した分解版右前処理 MINRES 法の $R(AM^{-1})^{\perp_{M-1}} = R(A)^{\perp_{M-1}}$ 成分から $V_2^{(j)} T_j = [0, \dots, 0] \in \mathbb{R}^{(n-r) \times j}$ である．

一方、行列 $T_j \in \mathbb{R}^{j \times j}$ が正則であるとする、 T_j^{-1} は存在するので、 $V_2^{(j)} = [0, \dots, 0] \in \mathbb{R}^{(n-r) \times j}$ になる．しかしながら、inconsistent な系である場合、 $\mathbf{b}_2 \neq \mathbf{0}$ なので、 $\mathbf{v}_2^{(1)} = \mathbf{b}_2$ ということから、 $V_2^{(j)}$ の一列目のベクトルが 0 ということに反し、矛盾が起きる．したがって、行列 $T_j \in \mathbb{R}^{j \times j}$ は特異であり、(項目 b) は証明できた．

次に (項目 a) を証明する．(項目 b) が成立することから、 $\exists \mathbf{w} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^j; T_j \mathbf{w} = \mathbf{0}$ が成立する．したがって、 $V_1^{(j)} T_j \mathbf{w} = \mathbf{0}$ を満たす $\mathbf{w} \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^j$ が存在する．よって、式 (5.12) より、 $A_{11} V_1^{(j)} \mathbf{w} = \mathbf{0}$ となる．行列 $A_{11} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ は正則行列であるので、 $V_1^{(j)} \mathbf{w} = \mathbf{0}$ となる．

仮に、 $\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(j)} \in \mathbb{R}^r$ が線形独立だとすると、 $\mathbf{w} \neq \mathbf{0}$ であるので、 $V_1^{(j)} \mathbf{w} \neq \mathbf{0}$ が成立となり、矛盾する．

したがって、 $\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_1^{(j)} \in \mathbb{R}^r$ は線形従属である．次に行列 $V^{(j)} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ を

$$(5.13) \quad V^{(j)} = \begin{bmatrix} V_1^{(j)} \\ V_2^{(j)} \end{bmatrix}$$

と定義する．そうすると、行列 $V^{(j)}$ の各列ベクトルは線形独立であり、 $\text{rank} V^{(j)} = j$ である．また inconsistent な場合を今回考えており、 $\mathbf{b}_2 \neq \mathbf{0}$ なので、Algorithm 4 の $R(AM^{-1})^{\perp_{M-1}} = R(A)^{\perp_{M-1}}$ 成分のアルゴリズムより、 $\text{rank} V_2^{(j)} = 1$ である．したがって、正則行列 $F_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 、正則行列 $F_2 \in \mathbb{R}^{j \times j}$ が存在し、正則行列 F_2 を右からかけてさらに正則な行列 F_1 を左からかける変換により、

$$(5.14) \quad F_1 V^{(j)} F_2 = \begin{bmatrix} \hat{V}_1^{(j)} \\ \mathbf{e}_{n-r}, 0 \end{bmatrix}$$

となる．ここで $\hat{V}_1^{(j)} \in \mathbb{R}^{r \times j}$ とする．また $\mathbf{e}_{n-r} = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^{n-r}$ を表す．

もし、 $\text{rank} V_1^{(j)} \leq j - 2$ とすると、正則行列 $F_3 \in \mathbb{R}^{j \times j}$ が存在し、さらに正則行列 F_3 を右からかける変換により、

$$(5.15) \quad F_1 V^{(j)} F_2 F_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \check{V}_1^{(j)} \\ \mathbf{e}_{n-r} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

となり, $\text{rank} V_1^{(j)} = j$ であることと矛盾する. なお, $\tilde{V}_1^{(j)} \in \mathbb{R}^{r \times (j-2)}$ とする. したがって, inconsistent な系に対しては, $V_1^{(j)}$ の列ベクトルが線形従属であることは示しているのので, $\text{rank} V_1^{(j)} = j - 1$ である. よって (項目 a) は証明できた.

$$(\text{項目 a}) \text{rank} V_1^{(j)} = j - 1$$

であることから,

$$(5.16) \quad V_1^{(j)} P = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{V}_1^{(j-1)} \end{bmatrix}$$

となるような, 正則行列 $P \in \mathbb{R}^{j \times j}$ が存在する. ここで $\tilde{V}_1^{(j-1)} \in \mathbb{R}^{r \times (j-1)}$ であり, $\text{rank} V_1^{(j)} = j - 1$ であることから, 行列 P が正則行列であることから, $\text{rank} \tilde{V}_1^{(j-1)} = j - 1$ になり, $\tilde{V}_1^{(j-1)}$ の列ベクトルは線形独立である. なお, 行列 $Q \in \mathbb{R}^{r \times j}$ を $Q = V_1^{(j)} P$ と定義する. 式 (5.16) より, 行列 Q の一列目は 0 ベクトルである.

$$(5.17) \quad Q = V_1^{(j)} P = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{V}_1^{(j-1)} \end{bmatrix}$$

式 (5.12) に対して, 正則行列 P を右からかけることにより,

$$(5.18) \quad A_{11} Q = Q P^{-1} T_j P$$

を得る. ただし, $V_1^{(j)} P = Q$ であり, 行列 P が正則行列であることを利用している. 行列 $S = [s_{i,j}] \in \mathbb{R}^{j \times j}$ を $S = P^{-1} T_j P$ と定義し, $\tilde{V}_1^{(j-1)} = [\tilde{v}_1^{(1)}, \dots, \tilde{v}_1^{(j-1)}]$ としたとき, 式 (5.17) の第一列ベクトルが 0 であることを考慮し, 式 (5.18) の両辺の第一列ベクトルを比較すると, $\mathbf{0} = s_{2,1} \tilde{v}_1^{(1)} + s_{3,1} \tilde{v}_1^{(2)} + \dots + s_{j,1} \tilde{v}_1^{(j-1)}$ が成立し, $\tilde{v}_1^{(1)}, \dots, \tilde{v}_1^{(j-1)}$ は線形独立であることから, $s_{2,1} = s_{3,1} = \dots = s_{j,1} = 0$ である.

行列 $S \in \mathbb{R}^{j \times j}$ の 1 行目, 1 列目を除いた部分行列を $S_{j-1} \in \mathbb{R}^{(j-1) \times (j-1)}$ とし, 式 (5.18) の両辺の 2 列目以降を比較すると,

$$(5.19) \quad A_{11} \tilde{V}_1^{(j-1)} = \tilde{V}_1^{(j-1)} S_{j-1}$$

である. なお, $\text{rank} \tilde{V}_1^{(j-1)} = j - 1$ である.

行列 S_{j-1} の固有値を λ , それに相当する固有ベクトルを $\mathbf{w}_1 \neq \mathbf{0}$ とする. $\mathbf{w}_1 \neq \mathbf{0}$ であることと, $\text{rank} \tilde{V}_1^{(j-1)} = j - 1$ であることから, $\tilde{V}_1^{(j-1)} \mathbf{w}_1 \neq \mathbf{0}$ が成立する.

式 (5.19) より, $A_{11} \tilde{V}_1^{(j-1)} \mathbf{w}_1 = \tilde{V}_1^{(j-1)} S_{j-1} \mathbf{w}_1 = \lambda \tilde{V}_1^{(j-1)} \mathbf{w}_1$ となる. $\tilde{V}_1^{(j-1)} \mathbf{w}_1 \neq \mathbf{0}$ であることから, λ は行列 A_{11} の固有値であり, $\tilde{V}_1^{(j-1)} \mathbf{w}_1$ は λ に相当する行列 A_{11} の固有ベクトルになる.

行列 A_{11} は正則であることから, $\lambda \neq 0$ であるので, 行列 $S_{j-1} \in \mathbb{R}^{(j-1) \times (j-1)}$ は正則行列になる.

一方, (項目 b) より, 行列 T_j は特異行列なので, 行列 P が正則行列であることを利用すると, $S = P^{-1} T_j P$ は特異行列である. したがって, $s_{2,1} = s_{3,1} = \dots = s_{j,1} = 0$ を利用

すると, $\det S = s_{1,1} \det S_{j-1} = 0$ であるが, 行列 S_{j-1} は正則行列であることから, $s_{1,1}$ は 0 となる. したがって, 行列 $S = P^{-1}T_jP$ の一列目は 0 ベクトルになる.

そこで, **Algorithm 4** で示した分解版右前処理 MINRES 法の 15 行目に戻り, $\gamma_{j+1} = 0$ のとき, $k := j$ であることと, 式 (5.12) を使い,

$$(5.20) \quad \begin{aligned} \min_{y_k \in \mathbb{R}^k} \|\gamma_1 v_1^{(1)} - A_{11}[v_1^{(1)}, \dots, v_1^{(k)}]y_k\|_2 &= \min_{y_k \in \mathbb{R}^k} \|\gamma_1 v_1^{(1)} - A_{11}V_1^{(k)}y_k\|_2 \\ &= \min_{y_k \in \mathbb{R}^k} \|\gamma_1 v_1^{(1)} - V_1^{(k)}T_k y_k\|_2 \end{aligned}$$

という最小二乗問題が解けることを示す. なお, $e_k = (1, \dots, 0) \in \mathbb{R}^k$ とする.

$$\begin{aligned} \gamma_1 v_1^{(1)} - V_1^{(k)}T_k y_k &= \gamma_1 V_1^{(k)}e_k - V_1^{(k)}T_k y_k \\ &= \gamma_1 QP^{-1}e_k - QP^{-1}T_k y_k \\ &= \gamma_1 QP^{-1}e_k - QP^{-1}T_k P(P^{-1}y_k) \end{aligned}$$

ここで $P^{-1}e_k = (\alpha_1, \dots, \alpha_k)^T \in \mathbb{R}^k$, $P^{-1}y_k = (\tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_k)^T \in \mathbb{R}^k$ とする.

式 (5.18) において, 行列 Q の一列目は 0 ベクトルであることと, 行列 $S = P^{-1}T_kP$ の一列目も 0 ベクトルであることから,

$$\begin{aligned} \gamma_1 v_1^{(1)} - V_1^{(k)}T_k y_k &= \gamma_1 QP^{-1}e_k - QP^{-1}T_k P(P^{-1}y_k) \\ &= \gamma_1 \tilde{V}_1^{(k-1)}(\alpha_2, \dots, \alpha_k)^T - \tilde{V}_1^{(k-1)}S_{k-1}(\tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_k)^T \\ &= \tilde{V}_1^{(k-1)}\{\gamma_1(\alpha_2, \dots, \alpha_k)^T - S_{k-1}(\tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_k)^T\} \end{aligned}$$

γ_1 はスカラ値, $S_{k-1} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times (k-1)}$ は正則行列で, $\text{rank} \tilde{V}_1^{(k-1)} = k-1$ なので

$$(5.21) \quad (\tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_k)^T = \gamma_1 S_{k-1}^{-1}(\alpha_2, \dots, \alpha_k)^T$$

が式 (5.20) に示した最小二乗問題

$$\min_{y_k \in \mathbb{R}^k} \|\gamma_1 v_1^{(1)} - A_{11}[v_1^{(1)}, \dots, v_1^{(k)}]y_k\|_2$$

の解になり, このノルムは 0 になる.

したがって, **Algorithm 4** で示した分解版右前処理 MINRES 法において, $\gamma_{j+1} = 0$ ならば, $k := j$ としたとき, $R(A)$ 成分について

$$\begin{aligned} z_1^{(k)} &= z_1^{(0)} + [v_1^{(1)}, \dots, v_1^{(k)}]y_k \\ &= z_1^{(0)} + [0, \tilde{v}_1^{(1)}, \dots, \tilde{v}_1^{(k-1)}]P^{-1}y_k \\ &= z_1^{(0)} + [\tilde{v}_1^{(1)}, \dots, \tilde{v}_1^{(k-1)}]\gamma_1 S_{k-1}^{-1}(\alpha_2, \dots, \alpha_k)^T \end{aligned}$$

が最小二乗解になり, そのときの残差の二乗ノルムは 0 になる.

したがって、(項目 2) がいう、 $\gamma_{j+1} = 0$ ならば、 $R(A) = R(AM^{-1})$ 成分の j ステップ目で得られている $z_1^{(j)}$ は、 $A_{11}z_1 = b_1$ の解になることは証明された。

次に (項目 3) を背理法で証明する。 $\gamma_{j+1} \neq 0$ である限り、(項目 2) の証明での式 (5.13) で定義された $V^{(j+1)} \in \mathbb{R}^{n \times (j+1)}$ (ただし、 j を $j+1$ に変更) は、行列 M^{-1} の内積空間での直交基底なので、 $\text{rank} V^{(j+1)} = j+1$ である。今、inconsistent な系を考えているので、 $b_2 \neq 0$ であるため、Algorithm 4 の $R(AM^{-1})^{\perp_{M^{-1}}} = R(A)^{\perp_{M^{-1}}}$ 成分のアルゴリズムより、 $\text{rank} V_2^{(j)} = 1$ である。したがって、(項目 2) の証明での式 (5.14) 同様、正則行列 $F_4 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 、正則行列 $F_5 \in \mathbb{R}^{(j+1) \times (j+1)}$ が存在し、正則行列 F_5 を右からかけてさらに正則な行列 F_4 を左からかける変換により、

$$(5.22) \quad F_4 V^{(j+1)} F_5 = \begin{bmatrix} \hat{V}_1^{(j+1)} \\ e_{n-r}, 0 \end{bmatrix}$$

は導ける。ここで $\hat{V}_1^{(j+1)} \in \mathbb{R}^{r \times (j+1)}$ とする。

ここでもし $\text{rank} V_1^{(j+1)} \leq j-1$ とすると、(項目 2) の証明での式 (5.15) 同様、正則行列 $F_6 \in \mathbb{R}^{(j+1) \times (j+1)}$ が存在し、さらに正則行列 F_6 を右からかける変換により、

$$(5.23) \quad F_4 V^{(j+1)} F_5 F_6 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \check{V}_1^{(j+1)} \\ e_{n-r} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

となり、 $\text{rank} V^{(j+1)} = j+1$ であることと矛盾する。なお、 $\check{V}_1^{(j+1)} \in \mathbb{R}^{r \times (j-1)}$ とする。

よって $\gamma_{j+1} \neq 0$ である限り、 $\text{rank} V_1^{(j+1)} \geq j$ であり、(項目 3) は証明できた。

さらに (項目 4) を背理法で証明する。 $j \leq n$ では必ず $\gamma_{j+1} \neq 0$ とする。式 (5.13) によって定義される行列 $V^{(j+1)} \in \mathbb{R}^{n \times (j+1)}$ の列ベクトル (ただし、式 (5.13) において j を $j+1$ に変更) は、 $\gamma_{j+1} \neq 0$ である限り Algorithm 4 に示した分解版右前処理 MINRES 法の 12 行目の $\gamma_{j+1} = \|v^{(j+1)}\|_{M^{-1}} = (\|v_1^{(j+1)}\|_2^2 + \|v_2^{(j+1)}\|_2^2)^{\frac{1}{2}}$ ならびに 9 行目から 11 行目より、 M^{-1} の内積空間での正規直交基底であるため線形独立である。したがって $j = n$ の場合、 $\text{rank} V^{(j+1)} = \text{rank} V^{(n+1)} = n+1$ になる。一方で行列 $V^{(n+1)} \in \mathbb{R}^{n \times (n+1)}$ であることから、 $\text{rank} V^{(n+1)}$ は最大でも n であるので矛盾が起きる。よって (項目 4) がいう、 $j \leq n$ までに必ず $\gamma_{j+1} = 0$ になることは証明された。

(項目 1)、(項目 2) から $\gamma_{j+1} \neq 0$ である限り、分解版右前処理 MINRES 法は破綻しないし、 $\gamma_{j+1} = 0$ のときは $R(A) = R(AM^{-1})$ 成分の j ステップ目で得られている $z_1^{(j)}$ は、 $A_{11}z_1 = b_1$ の解になる。

加えて (項目 4) から分解版右前処理 MINRES 法は最大でも n 反復すれば、 $\gamma_{j+1} = 0$ となるので、そのときには (項目 2) から $z_1^{(j)}$ は、 $A_{11}z_1 = b_1$ の解になる。

また Algorithm 4 で示した分解版右前処理 MINRES 法の $R(AM^{-1}) = R(A)$ を解くことに相当する。行列 $A_{11} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ は正則な対称行列であり $b_1 \in \mathbb{R}^r$ であることから、(項目 3) を利用すると分解版右前処理 MINRES 法を $\gamma_{j+1} \neq 0$ ($j = 1, \dots, r$) である限り、最大でも $r+1$ 回反復すると $\text{rank} V_1^{(r+1)} \geq r$ になる。したがって $z_1^{(r+1)} = z_1^{(0)} + V_1^{(r+1)} y_{r+1} =$

$z_1^{(0)} + [v_1^{(1)}, \dots, v_1^{(r+1)}]y_{r+1}$ を使えば, 分解版右前処理 MINRES 法は $\gamma_{j+1} \neq 0$ ($j = 1, \dots, r$) である限り, 最大でも $r + 1$ 回反復すれば, その $R(AM^{-1}) = R(A)$ 成分は最小二乗問題

$$\min_{z_1 \in \mathbb{R}^r} \|b_1 - A_{11}z_1\|_2$$

を解き, そのときの残差の 2 乗ノルムは 0 になっている. このとき, 式 (5.11) より,

$$\|b - Ax\|_{M^{-1}}^2 = \|b_2\|_2^2$$

となり, 分解版右前処理 MINRES 法の解は $\|b - Ax\|_{M^{-1}}$ を最小化している.

以上の議論から, inconsistent な系に対して右前処理 MINRES 法は任意の初期ベクトルに対して, 破綻することなく,

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_{M^{-1}} = \min_{z \in \mathbb{R}^n} \|b - AM^{-1}z\|_{M^{-1}}$$

の解 $x = M^{-1}z$ に収束し, 収束に要する反復数は最大でも $\min(r + 1, n)$ (なお, $r = \text{rank} A$) であることが証明できた.

定理 5.7 Algorithm 4 で示した右前処理 MINRES 法について以下が成立する.

(項目 (i)) $z^{(j)}$ の $R(A) = R(AM^{-1})$ 成分である $z_1^{(j)}$ は $A_{11}Q_1^T M^{-1}b$ に収束する.

(項目 (ii)) さらに Consistent な系の場合, 即ち $b \in R(A) = R(AM^{-1})$ (つまり, $b_2 = Q_2^T M^{-1}b = 0$) であれば, $z^{(j)}$ の $R(AM^{-1})^{\perp_{M^{-1}}} = R(A)^{\perp_{M^{-1}}}$ 成分である $z_2^{(j)}$ が $z_2^{(0)} = Q_2^T M^{-1}z^{(0)}$ なので, $z^{(j)}$ は, $Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1}b + Q_2 Q_2^T M^{-1}z^{(0)}$ に収束する. したがって, 解 $x^{(j)} = M^{-1}z^{(j)}$ は, $M^{-1}(Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1}b + Q_2 Q_2^T M^{-1}z^{(0)})$ に収束する.

(項目 (iii)) もし, $z^{(0)} \in R(A)$, 即ち, $x^{(0)} \in R(M^{-1}A)$ (つまり $z_2^{(0)} = Q_2^T M^{-1}z^{(0)} = 0$) 即ち, $z^{(j)}$ は, $Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1}b$, つまり,

$$\arg \min_{z \in \mathbb{R}^n} \|z\|_{M^{-1}}; \min_{z \in \mathbb{R}^n} \|b - AM^{-1}z\|_{M^{-1}}$$

に収束する. これは, 解 $x^{(j)} = M^{-1}z^{(j)}$ は, $M^{-1}Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1}b$, つまり,

$$\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|x\|_M; \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_{M^{-1}}$$

に収束することを意味する. ここで行列 M は右前処理行列である.

証明 まず, (項目 (i)) を証明する. $z^{(j)}$ の $R(A) = R(AM^{-1})$ 成分である $z_1^{(j)}$ は Algorithm 4 で示した分解版右前処理 MINRES 法のアルゴリズムにおいて, 行列 A_{11} は正則行列なので, $A_{11}^{-1}b_1 = A_{11}^{-1}Q_1^T M^{-1}b$ に収束する.

次に (項目 (ii)) を証明する．Consistent な系に対しては $b_2 = Q_2^T M^{-1} b = 0$ となるので，**Algorithm 4** で示した分解版右前処理 MINRES のアルゴリズムにおいて， $R(AM^{-1})^{\perp_{M^{-1}}} = R(A)^{\perp_{M^{-1}}}$ 成分をみると， $[v_2^{(1)}, \dots, v_2^{(j)}]$ の全ての列ベクトルは 0 である．したがって，15 行目の $z_2^{(k)} = z_2^{(0)} + [v_2^{(1)}, \dots, v_2^{(k)}] y_k$ (ただし， $k := j$) から $z_2^{(k)} = z_2^{(0)} = Q_2^T M^{-1} z^{(0)}$ となる．一方， $z_1^{(k)} = A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b$ である．

したがって， $k := j$ であることに注意して，

$$\begin{aligned} z^{(k)} &= Q \begin{bmatrix} z_1^{(k)} \\ z_2^{(k)} \end{bmatrix} \\ &= Q_1 z_1^{(k)} + Q_2 z_2^{(k)} \end{aligned}$$

であるので， $z^{(k)}$ は， $Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b + Q_2 Q_2^T M^{-1} z^{(0)}$ に収束する．したがって，解 $x^{(k)} = M^{-1} z^{(k)}$ は， $M^{-1}(Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b + Q_2 Q_2^T M^{-1} z^{(0)})$ に収束する． $k := j$ であることに注意すれば，(項目 (ii)) は証明された．

最後に，(項目 (iii)) を証明する． $z^{(0)} \in R(A)$ ，即ち， $x^{(0)} \in R(M^{-1}A)$ なので， $z_2^{(0)} = Q_2^T M^{-1} z^{(0)}$ が 0 となり，**Algorithm 4** で示した分解版右前処理 MINRES 法のアルゴリズムより， $z^{(j)}$ は， $Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b$ に収束する．

ここで， $(Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b, Q_2 Q_2^T M^{-1} z^{(0)})_{M^{-1}} = b^T M^{-1} Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} Q_2 Q_2^T M^{-1} z^{(0)}$ となる．一方， Q_1, Q_2 の列ベクトルが行列 M^{-1} の内積空間が直交することから， $Q_1^T M^{-1} Q_2 = 0$ である．よって， $(Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b, Q_2 Q_2^T M^{-1} z^{(0)})_{M^{-1}} = 0$ であるので，(項目 (ii)) を考慮すると，(項目 (iii)) の仮定のように初期ベクトルをとると， $z^{(j)}$ は

$$\min_{z \in \mathbb{R}^n} \|b - AM^{-1}z\|_{M^{-1}}$$

を満たす解のうちの $\arg \min_{z \in \mathbb{R}^n} \|z\|_{M^{-1}}$ を満たすことになり M は正定値行列なので解が一意に決まる．

さらに， $x^{(j)} = M^{-1} z^{(j)}$ は， $M^{-1} Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b$ に収束する．ここで，同様に， $Q_1^T M^{-1} Q_2 = 0$ であることを使うと， $(M^{-1} Q_1 A_{11}^{-1} Q_1^T M^{-1} b, M^{-1} Q_2 Q_2^T M^{-1} z^{(0)})_M = 0$ であるので，(項目 (ii)) を考慮すると，(項目 (iii)) の仮定のように初期ベクトルをとると，解 $x^{(j)} = M^{-1} z^{(j)}$ は，

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_{M^{-1}}$$

を満たす解のうちの，

$$\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|x\|_M$$

を満たすことになり， M は正定値行列なので解が一意に決まる．したがって，(項目 (iii)) は証明された．

また重み付き最小二乗問題と正規方程式の関係については，文献 [31, 32] に記述されており，残差ベクトル $r = b - Ax = b - AM^{-1}z$ に対して，重み付き最小二乗問題

$$\min \|r\|_{M^{-1}}$$

は正規方程式 $A^T M^{-1} r = 0$ と等価である．ここで，行列 A は対称なので，この正規方程式は $AM^{-1}r = 0$ になる．したがって，定理 5.6 で示した右前処理 MINRES 法と重み付き最小二乗問題

$$\min \|r\|_{M^{-1}}$$

の関係から，以下の命題 5.8 が成立する．本論文では，命題 5.8 の別証明を与える．

命題 5.8 前処理なし MINRES 法では $\|r\|_2$ を最小化しているのに対し，右前処理 MINRES 法では $\|M^{-\frac{1}{2}}r\|_2$ を最小化しており，これは $AM^{-1}r = 0$ を解くことと等価になる．

特に，特異な係数行列をもつ連立一次方程式 $Ax = b$ が consistent な場合，MINRES 法，右前処理 MINRES 法によって得られる解の残差ベクトルは 0 になる．

証明 Algorithm 2 で示した右前処理 MINRES 法のアルゴリズムの概要で記述したように，右前処理 MINRES 法は $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|r\|_{M^{-1}}$ となる x を求める手法になる．(ここで $r = b - Ax$ である．) 前処理行列 M は対称正定値行列なので，行列 $M^{-\frac{1}{2}}$ を定義でき，

$$\begin{aligned} \|r\|_{M^{-1}}^2 &= r^T M^{-1} r \\ &= (M^{-\frac{1}{2}} r)^T (M^{-\frac{1}{2}} r) \\ &= \|M^{-\frac{1}{2}} r\|_2^2 \end{aligned}$$

より，右前処理 MINRES 法は $\|M^{-\frac{1}{2}}r\|_2$ を最小化することがわかる．

$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|M^{-\frac{1}{2}}r\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|M^{-\frac{1}{2}}b - M^{-\frac{1}{2}}Ax\|_2$ は正規方程式 $(M^{-\frac{1}{2}}A)^T (M^{-\frac{1}{2}}A)x = (M^{-\frac{1}{2}}A)^T M^{-\frac{1}{2}}b$ と等価である．

この正規方程式から右前処理 MINRES 法が収束したとき， $AM^{-\frac{1}{2}}M^{-\frac{1}{2}}r = AM^{-1}r = 0$ が成り立つ．

したがって， $M^{-\frac{1}{2}}r \in N(AM^{-\frac{1}{2}}) = R(M^{-\frac{1}{2}}A)^\perp$ である．

一方，連立一次方程式が consistent ならば， $r = b - Ax \in R(A)$ である．

したがって $M^{-\frac{1}{2}}r \in R(M^{-\frac{1}{2}}A)$ を満たす．以上の議論から $M^{-\frac{1}{2}}r \in R(M^{-\frac{1}{2}}A) \cap R(M^{-\frac{1}{2}}A)^\perp$ となるので， $M^{-\frac{1}{2}}r = 0$ になる．行列 M は正定値行列なので， $r = 0$ になる．よって，元の連立一次方程式が consistent な時，右前処理 MINRES 法によって得られる解の残差ベクトル r は 0 になる．

次に前処理なしの MINRES 法を適用した場合も，consistent な場合は解の残差ベクトル r が 0 になることを示す．

連立一次方程式が consistent であるので， $r = b - Ax \in R(A)$ となる．また MINRES 法により， $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|r\|_2$ なので， A が対称行列であることを考慮すると，正規方程式 $Ar = 0$ が導かれる．よって $r \in N(A) = R(A)^\perp$ (行列 A の対称性も利用) となる．したがって，MINRES 法を特異な係数行列をもつ連立一次方程式に適用した時の解の残差ベクトル r について， $r \in R(A) \cap R(A)^\perp$ が導かれ， $r = 0$ となる．

5.4 収束判定方法

特異な係数行列をもつ連立一次方程式が consistent な場合は **Algorithm 3** にて $\frac{\|r_j\|_2}{\|v^{(1)}\|_2}$ の値が設定した値より小さくなった場合、右前処理 MINRES 法は収束したと判定する。

一方、特異な係数行列をもつ連立一次方程式が inconsistent な場合の右前処理 MINRES 法の収束判定方法について議論する。命題 5.8 にて記述したように、右前処理 MINRES 法は $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|r\|_{M^{-1}}$ となる x を求める手法であるため、 $\|M^{-\frac{1}{2}}r\|_2$ を最小化する。 $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|M^{-\frac{1}{2}}r\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|M^{-\frac{1}{2}}b - M^{-\frac{1}{2}}Ax\|_2$ は正規方程式 $(M^{-\frac{1}{2}}A)^T(M^{-\frac{1}{2}}A)x = (M^{-\frac{1}{2}}A)^T M^{-\frac{1}{2}}b$ と等価である。この正規方程式から右前処理 MINRES 法が収束したとき、 $AM^{-\frac{1}{2}}M^{-\frac{1}{2}}r = AM^{-1}r = 0$ が成り立つ。以上の議論から、 $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}v^{(1)}\|_2}$ の値が設定した値より小さくなった場合、右前処理 MINRES 法は収束したと判定する。なお、初期ベクトルを 0 とした場合、 $v^{(1)}$ は b と同一ベクトルである。

6. E-SSOR 右前処理 MINRES 法

本章で議論するのは，反復型前処理で，反復法として定常反復法を用いたものであり，3.2.2 節で述べたように，本論文では内部反復法と呼ぶ ([1, 2, 25, 26, 29])．内部反復法が効果があるためには，内部反復法に相当する前処理行列 M が正則で，今回右前処理を用いるので， $AM^{-1} \approx I_n$ (I_n は n 次の単位行列) を満たすことが望ましい．

内部反復を MINRES 法の前処理として用いる場合，その内部反復に用いる定常反復法の収束性は重要である．

SSOR 法は定常反復法の 1 つであり，正定値対称行列を係数行列とする連立一次方程式の場合，実数の加速パラメータ ω を $(0, 2)$ の範囲に取れば，線形方程式の解への収束は保証されている．

対角成分が 0 にならない半正定値行列を係数行列とする連立一次方程式の場合，SSOR 法の収束性に関する性質を [9] が論じている．その一つとして実数の加速パラメータ ω を $(0, 2)$ の範囲にとれば，SSOR 法で得られる各ステップでの残差ベクトルは収束するという事実を証明している．これらの背景を踏まえ，本研究では SSOR 法を特異な係数行列をもつ連立一次方程式への MINRES 法の前処理として採用した．また本研究の過程での数値実験において対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式へ SSOR 前処理による MINRES 法を用いたとき，SSOR 法の反復数を 1 回と 2 回以上の場合を比較すると，2 回以上の方が CPU 時間がかかるという結果が得られた．このため，本論文では以後 SSOR 法の反復数を 1 回として MINRES 法の前処理として用いる．

連立一次方程式の係数行列が正定値対称行列の場合，SSOR 法を内部反復数 1 回で用いた場合の前処理行列 M は [33] で記述されているように，実数の加速パラメータを ω とした時，以下の式で与えられる．ただし，係数行列 $A = L + D_0 + L^T$ とし， L は A の狭義下三角部分， D_0 は A の対角部分とする．正定値対称行列の場合，対角行列 D_0 の全ての成分は正の実数なので D_0^{-1} ， $D_0^{-\frac{1}{2}}$ が存在する．

$$(6.1) \quad M = \frac{\omega}{(2-\omega)} \left(L + \frac{D_0}{\omega} \right) D_0^{-1} \left(L^T + \frac{D_0}{\omega} \right)$$

本研究では対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式が対象なので，係数行列は半正定値や不定値行列 (固有値が正負混合) である場合がある．係数行列が半正定値の場合，対角成分は 0 以上である．係数行列が不定値行列の場合，対角成分は正負，0 混合の場合がある．

そこで特異な係数行列をもつ連立一次方程式に対し，SSOR 法を反復数 1 回にして，MINRES 法の前処理として用いる場合，対角行列 D の成分を D_0 の成分が正の値の場合はその値をそのまま定義するが，非正である対角成分に対しては，正の値に置き換え，行列 D を正の対角行列として定義する．その場合前処理行列 M は以下のように定義し，特

異なる連立一次方程式への SSOR 前処理行列として用いる．

$$(6.2) \quad M = \frac{\omega}{(2-\omega)}(L + \frac{D}{\omega})D^{-1}(L^T + \frac{D}{\omega})$$

行列 M が正定値行列であれば， M は正則なので定理 5.1 の式 (5.1) の必要十分条件 $R(A) = R(AM^{-1})$ は成立する．また右前処理 MINRES 法の定式化にあたり，行列 M^{-1} に関する内積が行列 M^{-1} が正定値行列であれば定義できる．

対角行列 D の全ての対角成分が正であるため，行列 $(L + \frac{D}{\omega})$ は正則行列であるので，シルベスターの慣性則より，行列 $(L + \frac{D}{\omega})D^{-1}(L^T + \frac{D}{\omega})$ の正，負，零の固有値の数は各々対角行列 D の正，負，零の固有値の数と同じである．ここで，対角行列 D の対角成分は全て正であるため，行列 $(L + \frac{D}{\omega})D^{-1}(L^T + \frac{D}{\omega})$ の固有値は全て正になる．したがって， $\frac{\omega}{(2-\omega)}$ が正であること，すなわち $\omega \in (0, 2)$ であることが，式 (6.2) で定義される行列 M が正定値行列であるための必要十分条件である．

ところで，CG 法で SSOR 法の反復 1 回を前処理として用いる場合，Eisenstat's trick を用いると (以下，E-SSOR 前処理と略記する) 行列ベクトル積の計算が削減され，かつ収束性が変わらないので結果として CPU 時間は短縮されることが知られている ([11]) ．

つまり，連立一次方程式 (1.1) を

$$D^{-1}[(D+L)^{-1}A(D+L^T)^{-1}](D+L^T)x = D^{-1}(D+L)^{-1}b$$

のように両側から前処理し，CG 法を適用する．ここで $\hat{A} = [(D+L)^{-1}A(D+L^T)^{-1}]$ としたとき，CG 法での行列ベクトル積を

$$\hat{A}v = (D+L^T)^{-1}v + (D+L)^{-1}[v - (2D - D_0)(D+L^T)^{-1}v]$$

という形にする．すなわち，行列ベクトル積を前進後退代入，対角行列とベクトル積という演算に置き換えることで計算量を削減する手法が Eisenstat's trick である．

この手法をわれわれの右前処理 MINRES 法にも適用したい．しかしながら，E-SSOR 前処理を用いる際は，両側前処理にしないといけないので，ここまで議論してきた右前処理 MINRES 法に直接は適用できない．一方で両側前処理 MINRES 法を inconsistent な特異な係数行列をもつ連立一次方程式に適用すると，左前処理が入るため，前章にて述べたように，前処理行列が正則という条件だけでは問題の等価性が保たれるとは限らない．

そこで次節では式 (6.2) を **Algorithm 3** で示した右前処理 MINRES 法に適用したアルゴリズムにおいて，右前処理 MINRES 法が生成するベクトル $v^{(j)}$ に代わる新規のベクトルを定義する．その新規のベクトルを用いると，式 (6.2) で定義された SSOR 前処理用の行列 M を右前処理に用いた場合，元の連立一次方程式の係数行列 A に行列 M を両側前処理に用いた形で生成した行列と，新規のベクトルとの積の形を導出でき，Eisenstat's trick によって計算量を削減できるようになる．このアルゴリズムを E-SSOR 右前処理 MINRES 法として提案する．

6.1 E-SSOR 右前処理 MINRES 法の導出

Algorithm 3 の右前処理 MINRES 法における $\mathbf{v}^{(j)}$ に対して, $\tilde{\mathbf{v}}^{(j)} := D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}\mathbf{v}^{(j)}$ を定義する. ここで対角行列 D は対角成分がすべて正の値であり, 行列 L は狭義下三角行列なので行列 $(L + \frac{D}{\omega})$ は正則なので, $(L + \frac{D}{\omega})^{-1}$ が存在し, $\tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$ が定義できる.

Algorithm 3 の導出にあたり, 行列 M^{-1} の内積に関して行列 AM^{-1} が自己随伴であることを用いた. 具体的には **Algorithm 3** の 7 行目の δ_j の計算にあたり,

$$\begin{aligned}
 (6.3) \quad \delta_j &= (AM^{-1}\mathbf{v}^{(j)}, \mathbf{v}^{(j)})_{M^{-1}} \\
 &= \mathbf{v}^{(j)T} M^{-1} A M^{-1} \mathbf{v}^{(j)} \\
 &= ((M^{-1}\mathbf{v}^{(j)})^T, A M^{-1}\mathbf{v}^{(j)}) \\
 &= (\mathbf{u}^{(j)}, A\mathbf{u}^{(j)})
 \end{aligned}$$

としていた. この δ_j の計算では, 右前処理 MINRES 法なので, 一度 $\mathbf{u}^{(j)} = M^{-1}\mathbf{v}^{(j)}$ を計算した後, $A\mathbf{u}^{(j)}$ を計算する形になる. 行列 M を式 (6.2) で定義した場合, 両側前処理の形を導出できず, Eisenstat trick は使えないので, 行列 M^{-1} によって右前処理して作成したベクトルと行列 A との積を計算する形になる.

しかしながら, $\tilde{\mathbf{v}}^{(j)} := D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}\mathbf{v}^{(j)}$ を用いると, 式 (6.3) は以下のように変形できる.

$$\begin{aligned}
 (6.4) \quad \delta_j &= (AM^{-1}\mathbf{v}^{(j)}, \mathbf{v}^{(j)})_{M^{-1}} \\
 &= \mathbf{v}^{(j)T} M^{-1} A M^{-1} \mathbf{v}^{(j)} \\
 &= (\frac{2-\omega}{\omega})^2 \mathbf{v}^{(j)T} (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} (L + \frac{D}{\omega})^{-1} A (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} (L + \frac{D}{\omega})^{-1} \mathbf{v}^{(j)} \\
 &= (\frac{2-\omega}{\omega})^2 (D^{\frac{1}{2}} (L + \frac{D}{\omega})^{-1} \mathbf{v}^{(j)})^T D^{\frac{1}{2}} (L + \frac{D}{\omega})^{-1} A (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} (L + \frac{D}{\omega})^{-1} \mathbf{v}^{(j)} \\
 &= (\frac{2-\omega}{\omega})^2 \tilde{\mathbf{v}}^{(j)T} D^{\frac{1}{2}} (L + \frac{D}{\omega})^{-1} A (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}
 \end{aligned}$$

ここで行列 $\tilde{A} = D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}A(L^T + \frac{D}{\omega})^{-1}D^{\frac{1}{2}}$ と定義すると, 式 (6.4) は,

$$\begin{aligned}
 \delta_j &= (\frac{2-\omega}{\omega})^2 \tilde{\mathbf{v}}^{(j)T} \tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)} \\
 &= (\frac{2-\omega}{\omega})^2 (\tilde{\mathbf{v}}^{(j)}, \tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)})
 \end{aligned}$$

となり, $\tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$ の計算には $\tilde{A} = D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}A(L^T + \frac{D}{\omega})^{-1}D^{\frac{1}{2}}$ であることから, Eisenstat's trick を使うことができる. 即ち

$$(6.5) \quad \tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)} = D^{\frac{1}{2}} \{ (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} + (L + \frac{D}{\omega})^{-1} \{ I_n - (\frac{2D}{\omega} - D_0)(L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} \} \} D^{\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$$

とできる. ここで I_n は n 次の単位行列を意味する. 式 (6.5) により, $\tilde{A} \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$ という行列ベクトル積を対角行列とベクトルの積, 前進代入, 後退代入の形に置き換えて計算量を削減

するのが Eisenstat's trick である．式 (6.5) を計算する過程で， $y^{(j)} = (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} D^{\frac{1}{2}} \tilde{v}^{(j)}$ と定義する．Eisenstat's trick に従った，式 (6.5) の計算法を以下に示す．

$$(6.6) \quad \hat{v}^{(j)} = D^{\frac{1}{2}} \tilde{v}^{(j)}$$

$$(6.7) \quad y^{(j)} = (L^T + \frac{D}{\omega})^{-1} \hat{v}^{(j)}$$

$$(6.8) \quad s = (\frac{2D}{\omega} - D_0)y$$

$$(6.9) \quad t = \hat{v}^{(j)} - s$$

$$(6.10) \quad p = (L + \frac{D}{\omega})^{-1} t$$

$$(6.11) \quad \tilde{A} \tilde{v}^{(j)} = D^{\frac{1}{2}} (y^{(j)} + p)$$

これらの議論から右前処理 MINRES 法の **Algorithm 3** において，前処理行列 M を内部反復数 1 回の SSOR 前処理行列の式 (6.2) にしたときの E-SSOR 右前処理 MINRES 法の実装アルゴリズムを **Algorithm 5** に示す．E-SSOR 右前処理 MINRES 法については，右前処理 MINRES 法で行った，理論的な収束解析は行わないので，右前処理 MINRES 法の理論版のアルゴリズムである **Algorithm 3.1** のような，理論的アルゴリズムは示さない．

ただし，7 行目の計算で式 (6.6)，(6.7)，(6.8)，(6.9)，(6.10)，(6.11) を用いる．14 行目の $y^{(j)}$ は 7 行目の $u^{(j)}$ を計算する過程ですでに計算されているので，あらためて計算する必要はない．

6.2 E-SSOR 右前処理 MINRES 法における Eisenstat's trick による演算量の削減効果

6.1 節で導出した E-SSOR 右前処理 MINRES 法は，式 (6.2) を **Algorithm 3** で示した右前処理 MINRES 法に適用したアルゴリズムにおいて，Eisenstat's trick を用いて浮動小数点演算量 (以後演算量と呼ぶ) を削減した．本節では，その演算量の削減効果を論じる．

n ， $Lnnz$ をそれぞれ次元数，行列 A の狭義下三角部分における非零要素数とする．E-SSOR 右前処理 MINRES 法と，式 (6.2) を **Algorithm 3** で示した右前処理 MINRES 法に適用した反復法 (SSOR 右前処理 MINRES 法と呼ぶ) は収束条件を同じにすれば，理論上は同じ反復数で収束する．そこで，この反復数を m とする．

演算量の比較にあたり，スカラ値間のみの演算量は，ベクトルや行列に関する演算量に比べ，極めて小さいため，除いた．

Table 1 から，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の演算量は SSOR 右前処理 MINRES 法の演算量に比べ， $4Lnnz - 2n > 0$ である限り， $2(n + Lnnz) + 2(2Lnnz - n) \times m$ 分削減されている．

また収束に要する反復数 m が大きい場合，SSOR 右前処理 MINRES 法の演算量を 1 としたときの，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の演算量の比は $\frac{27n+4Lnnz}{25n+8Lnnz}$ になる．この

Algorithm 5 : Eisenstat SSOR for right preconditioned MINRES (実装版)

1. $\tilde{\mathbf{v}}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(0)} = \mathbf{0}, \mathbf{w}^{(1)} = \mathbf{0}$
 - 2: Choose initial approximate solution $\mathbf{x}^{(0)}$, compute $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$
 - 3: $\tilde{\mathbf{v}}^{(1)} = D^{\frac{1}{2}}(L + D/\omega)^{-1}\mathbf{v}^{(1)}$
 - 4: Set $\gamma_1 = \sqrt{\frac{2-\omega}{\omega}}(\tilde{\mathbf{v}}^{(1)}, \tilde{\mathbf{v}}^{(1)})$, set $\eta = \gamma_1, s_0 = s_1 = 0, c_0 = c_1 = 1$
 - 5: for $j = 1$ until convergence do
 - 6: $\tilde{\mathbf{v}}^{(j)} := \tilde{\mathbf{v}}^{(j)}/\gamma_j$
 - 7: $\mathbf{u}^{(j)} = \tilde{A}\tilde{\mathbf{v}}^{(j)}$
 - 8: $\delta_j = (\frac{2-\omega}{\omega})^2(\tilde{\mathbf{v}}^{(j)}, \mathbf{u}^{(j)})$
 - 9: $\tilde{\mathbf{v}}^{(j+1)} = (\frac{2-\omega}{\omega})\mathbf{u}^{(j)} - \delta_j\tilde{\mathbf{v}}^{(j)} - \gamma_j\tilde{\mathbf{v}}^{(j-1)}$
 - 10 : $\gamma_{j+1} = \sqrt{(\frac{2-\omega}{\omega})(\tilde{\mathbf{v}}^{(j+1)}, \tilde{\mathbf{v}}^{(j+1)})}$
 - 11 : $\alpha_0 = c_j\delta_j - c_{j-1}s_j\gamma_j, \alpha_1 = \sqrt{\alpha_0^2 + \gamma_{j+1}^2}$
 - 12: $\alpha_2 = s_j\delta_j + c_{j-1}c_j\gamma_j, \alpha_3 = s_{j-1}\gamma_j$
 - 13: $c_{j+1} = \alpha_0/\alpha_1, s_{j+1} = \gamma_{j+1}/\alpha_1$
 - 14: $\mathbf{w}^{(j+1)} = ((\frac{2-\omega}{\omega})\mathbf{y}^{(j)} - \alpha_3\mathbf{w}^{(j-1)} - \alpha_2\mathbf{w}^{(j)})/\alpha_1$
 - 15: $\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{x}^{(j-1)} + c_{j+1}\eta\mathbf{w}^{(j+1)}$
 - 16 : $\eta = -s_{j+1}\eta$
 - 17: $\mathbf{r}_j = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(j)}$
 - 18: check convergence
 - 19: end do
-

Table 1. Comparison of MINRES with SSOR and E-SSOR right preconditioning

Method	Computation cost
MINRES with SSOR right preconditioning	$9n + 8Lnnz + (25n + 8Lnnz) \times m$
MINRES with E-SSOR right preconditioning	$7n + 6Lnnz + (27n + 4Lnnz) \times m$

Eisenstat's trick による計算時間の削減効果については、次章で報告する。

7. 数値実験・結果 (E-SSOR 右前処理 MINRES 法の検証)

本章では、まず 6 章で提案した E-SSOR 右前処理 MINRES 法を特異な係数行列をもつ、inconsistent な連立一次方程式に適用し、6.2 節で述べた Eisenstat's trick による演算量の削減効果を結びつけるため、Eisenstat's trick による計算時間の削減効果を報告する。

さらに E-SSOR 右前処理 MINRES 法を特異な係数行列をもつ、consistent ならびに inconsistent な連立一次方程式に適用し、前処理なし MINRES 法 (以後 MINRES 法と記述)、スケーリング右前処理 MINRES 法と、性能ならびに収束性を比較する。いずれの手法でも初期ベクトルを $\mathbf{0}$ とした。報告する CPU 時間は、処理を 10 回行い、その平均値をとった。今回数値実験を行った係数行列はいずれも実対称半正定値行列である。

以下の数値実験では、CPU: Intel(R) Xeon(R) CPU ES-2630 (2.30GHz); OS: Cent OS 6.3 の計算機において、反復法を FORTRAN90 で実装し、全て倍精度演算で行った。またコンパイラは Intel Fortran 13.0.1 を使用した。

右前処理 MINRES 法で用いる前処理用の対角行列 M は、右前処理 MINRES 法の定式化で述べたように、正定値行列である必要がある。6 章の E-SSOR 右前処理 MINRES 法で述べたように、特異行列の対角成分は必ずしも正とは限らない。そこでスケーリング右前処理 MINRES 法の場合に用いるスケーリング行列 M 、E-SSOR 右前処理 MINRES 法の場合に用いる式 (6.2) で用いる対角行列 D をそれぞれ以下のように設定した。対角行列 D_0 は元の特異行列 A の対角成分である。

$$(7.1) \quad M_{(i,i)} = \max_j |A_{(i,j)}| : \text{if } \max_j |A_{(i,j)}| > 10^{-8}$$

$$(7.2) \quad M_{(i,i)} = 1 : \text{if } \max_j |A_{(i,j)}| \leq 10^{-8}$$

$$(7.3) \quad D_{(i,i)} = D_{0(i,i)} : \text{if } D_{0(i,i)} > 10^{-8}$$

$$(7.4) \quad D_{(i,i)} = 1 : \text{if } D_{0(i,i)} \leq 10^{-8}$$

行列の下の添え字は例えば (i, j) ならばその行列の (i, j) 成分を意味する。

E-SSOR 右前処理 MINRES 法の場合の対角行列とスケーリング右前処理 MINRES 法の場合のスケーリング行列 (式 (7.1), 式 (7.2)) について、異なる方式を使った。ここで SSOR 法を内部反復数 1 回の場合の前処理行列は対角成分が正の値であれば、式 (6.1) で表現されるので、E-SSOR 右前処理 MINRES 法の対角行列として式 (7.3) を採用した。実際、今回数値実験に利用した、3 つの行列の対角成分は全て 10^{-8} より大きいため、式 (7.3), (7.4) ならびに式 (6.2) で定義した前処理行列 M は式 (6.1) になる。

7.1 E-SSOR 右前処理 MINRES 法における Eisenstat's trick による計算時間の削減効果

6.2 節では, E-SSOR 右前処理 MINRES 法と SSOR 右前処理 MINRES 法の演算量を比較し, Eisenstat's trick による演算量の削減効果を論じた.

本節では両手法の計算時間の比較を行い, Eisenstat's trick の計算時間に対する削減効果を報告する. Table 9 に記述している係数行列が bcsstk25, bcsstk36 である inconsistent な系に対する, E-SSOR 右前処理 MINRES 法と SSOR 右前処理 MINRES 法の, 収束に要する反復数, CPU 時間をそれぞれ Table 2, Table 3 に示す. なお, inconsistent な系の設定方法は 7.4 節に示している.

CPU 時間は重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ の計算を除いた. また収束判定条件は, 係数行列が bcsstk25, bcsstk36 それぞれの場合, 重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ を 10^{-6} , 10^{-5} 以下とした. 理由として, リスタートしない場合, 重み付き正規方程式の相対残差ノルムはそれぞれの行列の場合, 10^{-7} , 10^{-6} 以下にならず, これら以上の精度のよい解を求めることは困難と判断したためである.

Table 2. Comparison of MINRES with SSOR and E-SSOR right preconditioning (Iter: number of iterations, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm). The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning.

Inconsistent problem. Convergence criterion: $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2} < 10^{-6}$ (**bcsstk25**)

Method	Iter	Tno [sec]
MINRES with SSOR right preconditioning	4,054 (1.02)	10.64 (2.15)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	3,959 (1)	4.956 (1)

Table 3. Comparison of MINRES with SSOR and E-SSOR right preconditioning (Iter: number of iterations, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm). The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning.

Inconsistent problem. Convergence criterion: $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2} < 10^{-5}$ (**bcsstk36**)

Method	Iter	Tno [sec]
MINRES with SSOR right preconditioning	13,439 (0.941)	93.88 (2.44)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	14,273 (1)	38.48 (1)

CPU 時間から行列 bcsstk25 の場合では E-SSOR 右前処理 MINRES 法は右前処理型 SSOR 前処理 MINRES 法に比べ、2.15 倍高速であり、また行列 bcsstk36 の場合では E-SSOR 右前処理 MINRES 法は右前処理型 SSOR 前処理 MINRES 法に比べ、2.44 倍高速であった。6.2 節にて右前処理型 SSOR 前処理 MINRES 法の演算量を 1 とした場合、E-SSOR 右前処理 MINRES 法の演算量の比は、両手法の反復回数を同じとしたとき、 $\frac{27n+4Lnnz}{25n+8Lnnz}$ であると報告した。ここで n は次元数、 $Lnnz$ は行列の狭義下三角部分の非零要素数である。Table 9 に記載されている対称行列 bcsstk25、bcsstk36 の次元数、狭義下三角成分の非零要素数からそれぞれの行列の場合、 $\frac{27n+4Lnnz}{25n+8Lnnz}$ は 0.668、0.566 である。それぞれの値の逆数は 1.5、1.77 になる。そこで演算量の見積もりからでは行列 bcsstk25、bcsstk36 の場合、E-SSOR 右前処理 MINRES 法は右前処理型 SSOR 前処理 MINRES 法に比べ、1.5 倍、1.77 倍高速になると考えられたが、数値実験では演算量の見積もりより CPU 時間の比較では高速になった。要因として非零要素成分に関する間接アドレスを使っていることが考えられる。

次節以降では以下の目的で数値実験を行い、その結果を報告する。

- 7.2 節の準定常電磁場解析と 7.3 節の静磁場問題といった実問題に対する提案手法の有効性の検証
- 7.4 節において悪条件な系に対する提案手法の有効性の検証

7.2 数値実験 1 (準定常電磁場解析)

7.2.1 Consistent な問題

2.2 節で述べた応用分野で扱われる係数行列が半正定値対称行列で、consistent な連立一次方程式を扱う。本行列データならびに右辺ベクトルデータは北海道大学岩下武史先生からご提供いただいた。テスト問題の次元数は、34,642 である。収束判定条件は、 $\frac{\|r_j\|_2}{\|b\|_2} < 10^{-7}$ と設定する。Table 4 に各手法の反復数と CPU 時間を示す。なお、E-SSOR 右前処理 MINRES 法の加速パラメータ ω は (0, 2) の間の複数の値を利用した結果、最も反復数が小さかった 1.4 を用いた (Table 5 参照)。

特異な係数行列をもつ consistent な連立一次方程式に MINRES 法を適用した場合、4 節で述べたように、収束判定のために毎ステップ得られた解から残差ノルム $\|r_j\|_2$ を計算する必要はなく、 $\|r\|$ を用いればよい。したがって、MINRES 法の Tno(残差ノルムの計算時間を含まない CPU 時間) に対し、スケーリング右前処理 MINRES 法と E-SSOR 右前処理 MINRES 法は Tres(残差ノルムの計算時間を含めた CPU 時間) を比較する。その結果、E-SSOR 右前処理 MINRES 法は、MINRES 法と比較し 48.6 倍、スケーリング右前処理法 MINRES 法と比較し、3.6 倍高速であった。

Fig. 1 に相対残差 $\frac{\|r_j\|_2}{\|b\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す。○ が前処理なし MINRES 法、△ がスケーリング右前処理 MINRES 法、★ が E-SSOR 右前処理 MINRES 法を表す。

Table 4. Computation results for a consistent problem (Iter: number of iterations, Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm) The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning.

Convergence criterion: $\frac{\|r_j\|_2}{\|b\|_2} < 10^{-7}$

Method	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
MINRES without preconditioning	10,276 (141)	15.42 (48.64)	15.42 (67.0)
MINRES with scaling right preconditioning	405 (5.55)	1.140 (3.60)	0.713 (3.10)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	73 (1)	0.317 (1)	0.230 (1)

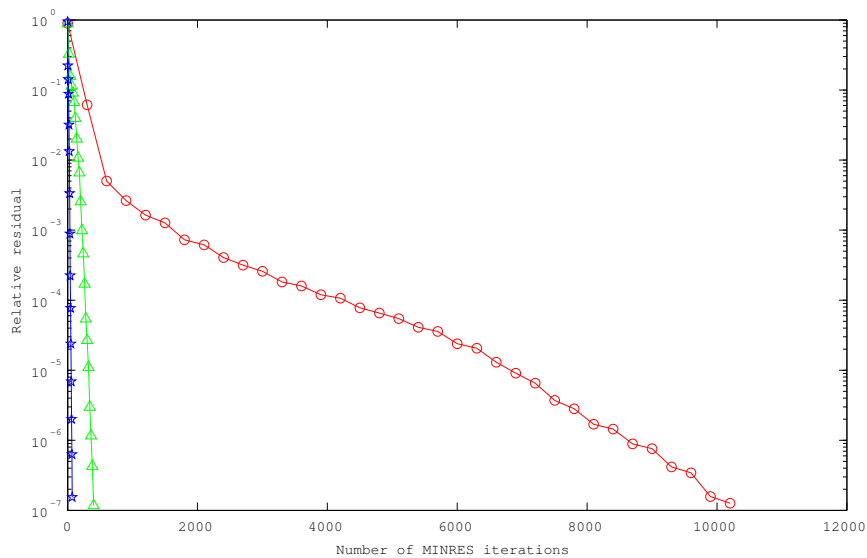


Fig. 1. $\frac{\|r_j\|_2}{\|b\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning(\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for a consistent problem

ここで，E-SSOR 右前処理 MINRES 法について加速パラメータ ω を $(0, 2)$ の間で 0.2 刻みで変化させた場合の，収束に要する反復数と，残差ノルム $\|r_j\|_2$ の計算を含めた CPU 時間 Tres を Table5 に示す．さらに横軸に加速パラメータ ω の値，縦軸に E-SSOR 右前処理 MINRES 法の反復数，CPU 時間を示した図を Fig. 2，Fig. 3 に示す．

Table5，Fig. 2，Fig. 3 から E-SSOR 右前処理 MINRES 法の反復数，CPU 時間については $\omega = 1.4$ と $\omega = 1.6$ がためた中では同程度に最適であった．

Table 5. Dependence of performance of MINRES with E-SSOR right preconditioning on ω (ω : acceleration parameter, Iter: number of iterations, Tres: computation time including the computation of the relative residual norm) for a consistent problem

Convergence criterion: $\frac{\|r_j\|_2}{\|b\|_2} < 10^{-7}$

ω	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
Iter	248	171	132	108	92	78	73*	74	98
Tres [sec]	1.062	0.750	0.568	0.468	0.391	0.339	0.317	0.315*	0.453

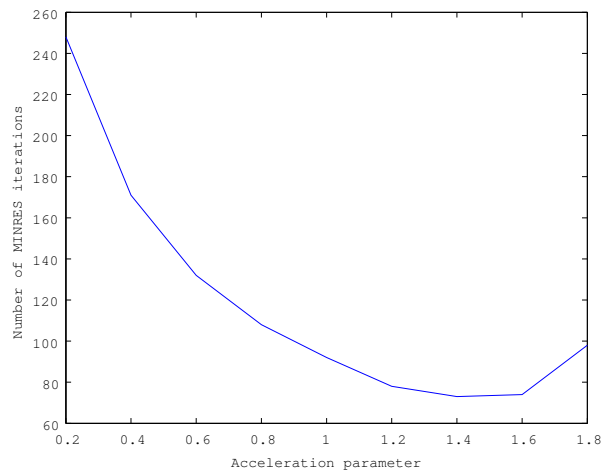


Fig. 2. Number of iterations to achieve relative residual $< 10^{-7}$ vs. ω for MINRES with E-SSOR right preconditioning for a consistent problem

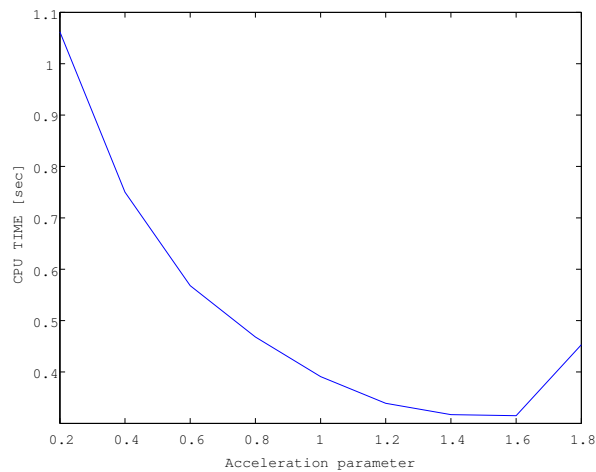


Fig. 3. CPU time to achieve relative residual $< 10^{-7}$ vs. ω for MINRES with E-SSOR right preconditioning for a consistent problem

7.2.2 Inconsistent な問題

次に，係数行列は前節と同じ行列を扱い， \mathbf{b} に対して， $\mathbf{b} + \|\mathbf{b}\|_2 \times \mathbf{u}(0, 1) \times 0.01$ を右辺ベクトルとして設定して，inconsistent な連立一次方程式を扱った．ここで $\mathbf{u}(0, 1)$ は FORTRAN90 の $[0, 1)$ の一様擬似乱数関数 random_number により各成分を生成した n 次元ベクトルである．

収束判定条件は， $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-6}$ と設定する．ここで M は前処理なし MINRES 法の場合は単位行列，スケーリング右前処理法 MINRES 法の場合は式 (7.1)，(7.2) で定義される対角行列，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の場合は式 (6.2) において対角行列 D を式 (7.3)，(7.4) により定めた行列として定義される．以後 $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を重み付き正規方程式の相対残差ノルムと呼ぶ．

Table 6 に各手法の反復数と CPU 時間を示す．ただし，前処理なし MINRES 法はこの収束条件では収束しなかった．なお，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の加速パラメータ ω は $(0, 2)$ の間の 0.2 刻みの複数の値を利用した結果，最も反復数が小さかった 1.4 を用いた．

Table 6. Computation results for an inconsistent problem (Iter: number of iterations, Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm) The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning.

Convergence criterion: $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-6}$

Method	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
MINRES with scaling right preconditioning	327 (5.84)	1.307 (2.17)	0.572 (3.09)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	56 (1)	0.601 (1)	0.185 (1)

重み付き正規方程式の相対残差ノルムの計算時間を含めた CPU 時間である Tres を比較すると E-SSOR 右前処理 MINRES 法はスケーリング右前処理 MINRES 法に比べ，2.17 倍高速であった．

Fig. 4 に重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す．○ が前処理なし MINRES 法，△ がスケーリング右前処理 MINRES 法，★ が E-SSOR 右前処理 MINRES 法を表す．

さらに E-SSOR 右前処理 MINRES 法について加速パラメータ ω を $(0, 2)$ の間で 0.2 刻みで変化させた場合の，収束に要する反復数と，残差ノルム計算を含めた CPU 時間 Tres を Table 7 に示す．ただし， ω が 0.2 の場合はこの収束判定条件では収束せず，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ は 201 ステップで 1.75×10^{-6} になり，この値以下にはならなかった．また横軸に加速パラメータ ω の値，縦軸に E-SSOR 右前処理 MINRES

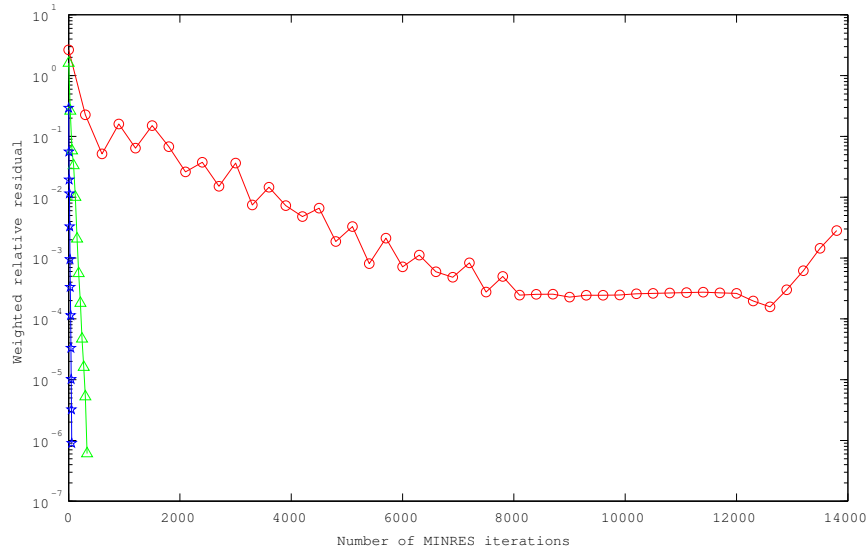


Fig. 4. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem

法の反復数，CPU 時間を示した図を Fig. 5，Fig. 6 に示す．

Table 7. Dependence of performance of MINRES with E-SSOR right preconditioning on ω (ω : acceleration parameter, Iter: number of iterations, Tres: computation time including the computation of the relative residual norm) for an inconsistent problem

ω	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
Iter	135	102	82	69	61	56*	59	76
Tres [sec]	1.448	1.083	0.978	0.733	0.652	0.601*	0.688	0.907

Table 7，Fig. 5，Fig. 6 から E-SSOR 右前処理 MINRES 法の反復数ならびに CPU 時間ともに $\omega = 1.4$ がためした中では最適であった．

7.3 数値実験 2 (静磁場問題)

2.3 節で述べた応用分野で扱われる係数行列が半正定値対称行列で，inconsistent な連立一次方程式を扱う．本行列データならびに右辺ベクトルデータは北海道大学五十嵐一先生からご提供いただいた．テスト問題の次元数は，5,362 である．収束判定条件は， $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-11}$ と設定する．Table 8 に各手法の反復数と CPU 時間を示す．なお，Table 8 に示す CPU 時間では，残差計算時間を含まない CPU 時間のみによる比較を行っ

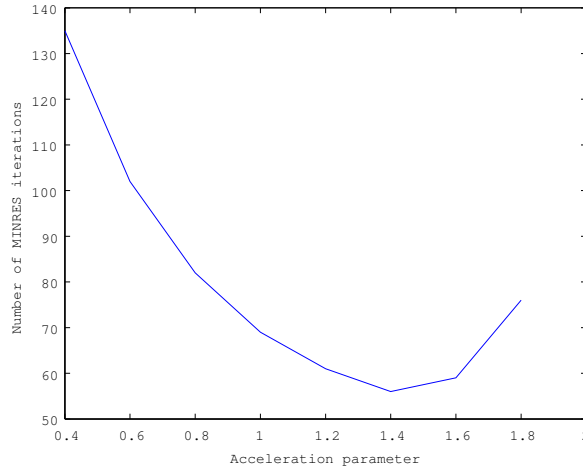


Fig. 5. Number of iterations to achieve relative residual $< 10^{-6}$ vs. ω for MINRES with E-SSOR right preconditioning for an inconsistent problem

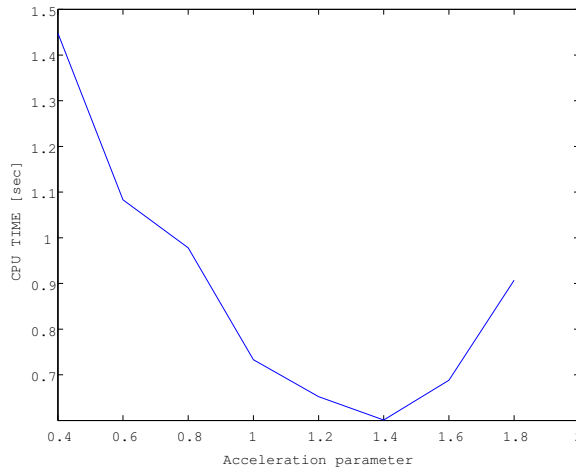


Fig. 6. CPU time to achieve relative residual $< 10^{-6}$ vs. ω for MINRES with right preconditioning for an inconsistent problem

ている．また，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の加速パラメータ ω は 1.0 を用いた．

重み付き正規方程式の相対残差ノルムの計算時間を除いた CPU 時間である T_{no} を比較すると E-SSOR 右前処理 MINRES 法はスケーリング右前処理 MINRES 法と比較し 2.72 倍，MINRES 法と比較し，5.95 倍高速であった．

Fig. 7 に重み付き正規方程式の相対残差 $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す．○が前処理なし MINRES 法，△がスケーリング右前処理 MINRES 法，★が E-SSOR 右前処理 MINRES 法を表す．

Table 8. Computation results for an inconsistent problem (Iter: number of iterations, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm) The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning.

Convergence criterion: $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2} < 10^{-11}$

Method	Iter	Tno [sec]
MINRES without preconditioning	381 (5.95)	0.0664 (2.66)
MINRES with scaling right preconditioning	174 (2.72)	0.0371 (1.48)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	64 (1)	0.025 (1)

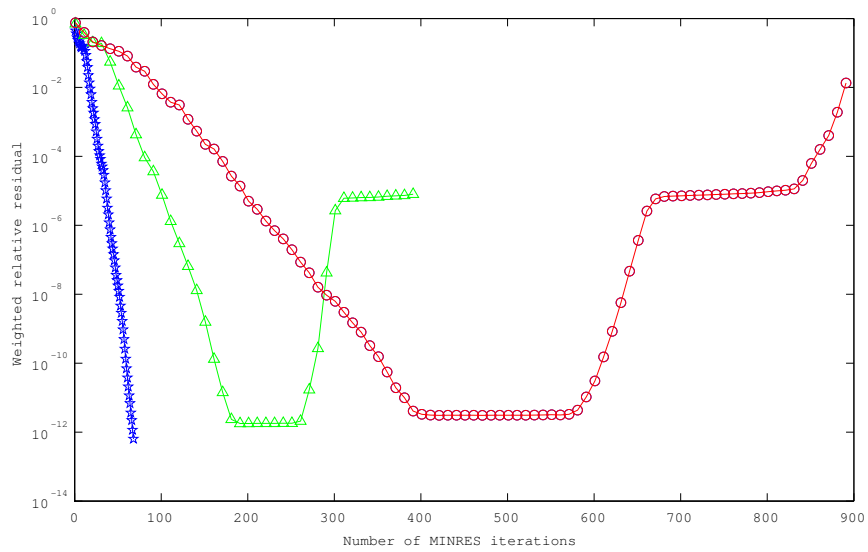


Fig. 7. $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem

7.4 数値実験 3 (The University of Florida Sparse Matrix Collection)

本節では, The University of Florida Matrix Collection [8] ならびに [14] に掲載されている倍精度演算の範囲では数値的にランク落ちしている (半正定値な) 2 個の行列に対して, consistent, inconsistent な連立一次方程式を扱った. 行列の情報を Table 9 に示す. ここで, n , nnz , $Lnnz$ はそれぞれ次元数, 非零要素数, 狭義下三角部分の非零要素数を表す. rank , $\kappa(A)$ は *MATLAB* の関数 **rank** と **svd** に基づいて計算された行列の階数, 条件数 (最大特異値と非零の最小特異値の比) である.

この 2 つの行列 A に対し, 特異な係数行列をもつ連立一次方程式を consistent,

Table 9. Characteristics of the coefficient matrices of the test problems

Matrix	n	nnz	Lnnz	rank	$\kappa(A)$	Application area
bcsstk25	15,439	252,241	118,401	15,435	4.41×10^{12}	structural problem
bcsstk36	23,052	1,143,140	560,044	23,020	7.43×10^{11}	structural problem

inconsistent とするために右辺ベクトル \mathbf{b} を以下のように設定した .

- consistent : $\mathbf{b} = A \times (1, 1, \dots, 1)^T$
- inconsistent : $\mathbf{b} = A \times (1, 1, \dots, 1)^T + \|A \times (1, 1, \dots, 1)^T\|_2 \times \mathbf{u}(0, 1) \times 0.01$

ただし , $\mathbf{u}(0, 1)$ は FORTRAN90 の $[0, 1)$ の一様擬似乱数関数 random_number により各成分を生成した n 次元ベクトルである .

7.4.1 Consistent な問題

まず ,consistent な問題の場合について ,行列 bcsstk25 ,bcsstk36 を係数行列とした場合の前処理なし MINRES 法 ,スケーリング右前処理 MINRES 法 ,E-SSOR 右前処理 MINRES 法の性能結果をそれぞれ Table 10 , Table 11 に示す . 収束判定条件は , $\frac{\|\mathbf{r}_j\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} < 10^{-7}$ と設定する . なお , 両方の行列の場合とも , E-SSOR 右前処理 MINRES 法の加速パラメータは 1.0 とした .

Table 10. Computation results for a consistent problem for **bcsstk25** (Iter: number of iterations, Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm) The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning
Convergence criterion: $\frac{\|\mathbf{r}_j\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} < 10^{-7}$

Method	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
MINRES without preconditioning	2,107 (23.2)	1.176 (7.95)	1.176 (10.9)
MINRES with scaling right preconditioning	168 (1.85)	0.172 (1.16)	0.112 (1.04)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	91 (1)	0.148 (1)	0.108 (1)

行列 bcsstk25 では E-SSOR 右前処理 MINRES 法は前処理なし MINRES 法に比べ , 7.95 倍 , スケーリング右前処理 MINRES 法に比べて 1.16 倍高速であった .

行列 bcsstk36 では E-SSOR 右前処理 MINRES 法は前処理なし MINRES 法に比べ , 2.48 倍 , スケーリング右前処理 MINRES 法に比べ , 1.68 倍の高速であった .

行列 bcsstk25 , bcsstk36 それぞれを係数行列とした場合について各々 Fig. 8 , Fig. 9 に相対残差ノルム $\frac{\|\mathbf{r}_j\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す . ◦ が前処理なし MINRES 法 , △ がスケーリング右前処理 MINRES 法 , ★ が E-SSOR 右前処理 MINRES 法を表す .

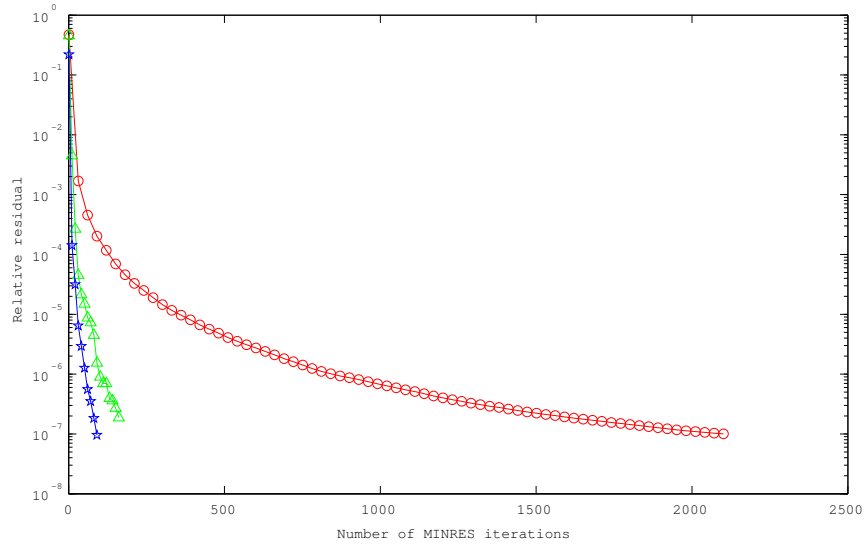


Fig. 8. MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (\triangle), and MINRES with E-SSOR preconditioning (\star) for a consistent problem (**bcsstk25**)

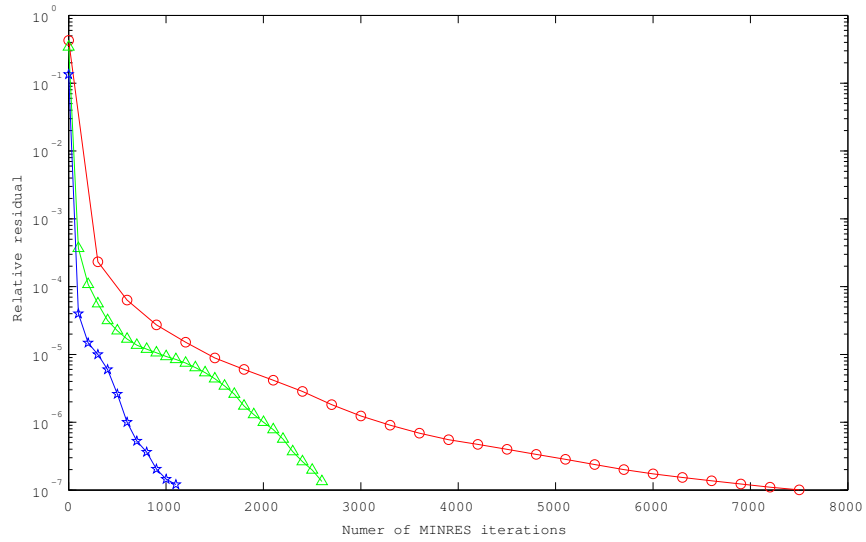


Fig. 9. MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (\triangle), and MINRES with E-SSOR preconditioning (\star) for a consistent problem (**bcsstk36**)

Table 11. Computation results for a consistent problem for **bcsstk36** (Iter: number of iterations, Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm) The values in () are the ratio compared to MINRES with E-SSOR right preconditioning.

Convergence criterion: $\frac{\|r_j\|_2}{\|b\|_2} < 10^{-7}$

Method	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
MINRES without preconditioning	7,533 (6.57)	11.21 (2.48)	11.21 (3.65)
MINRES with scaling right preconditioning	2,672 (2.33)	7.586 (1.68)	4.321 (1.41)
MINRES with E-SSOR right preconditioning	1,146 (1)	4.513 (1)	3.073 (1)

7.4.2 Inconsistent な問題

次に，行列 **bcsstk25**，**bcsstk36** を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対して，前処理なし MINRES 法，スケーリング右前処理 MINRES 法，E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用した場合，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. 反復数のグラフを各々 Fig. 10，Fig. 11 に示す．○が前処理なし MINRES 法，△がスケーリング右前処理 MINRES 法，★が E-SSOR 右前処理 MINRES 法を表す．なお，両方の行列の場合とも，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の加速パラメータは 1.0 とした．

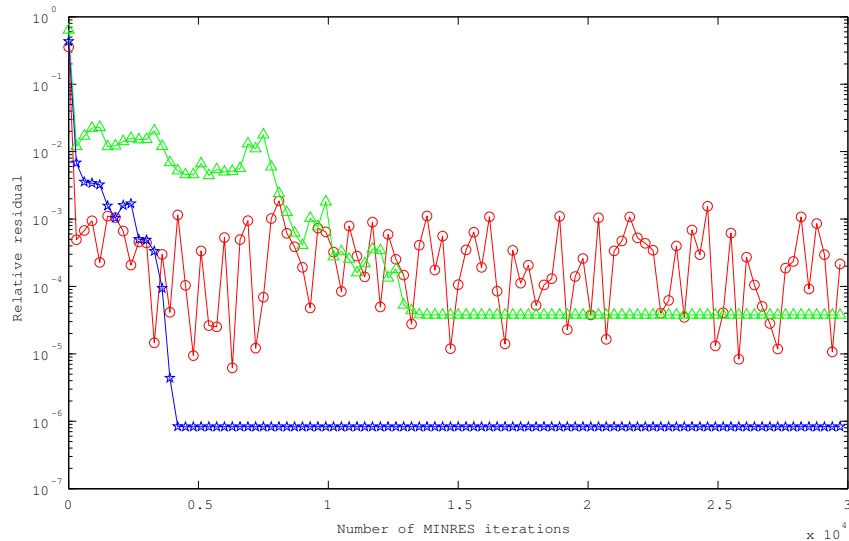


Fig. 10. $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning (○), MINRES with scaling right preconditioning (△), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

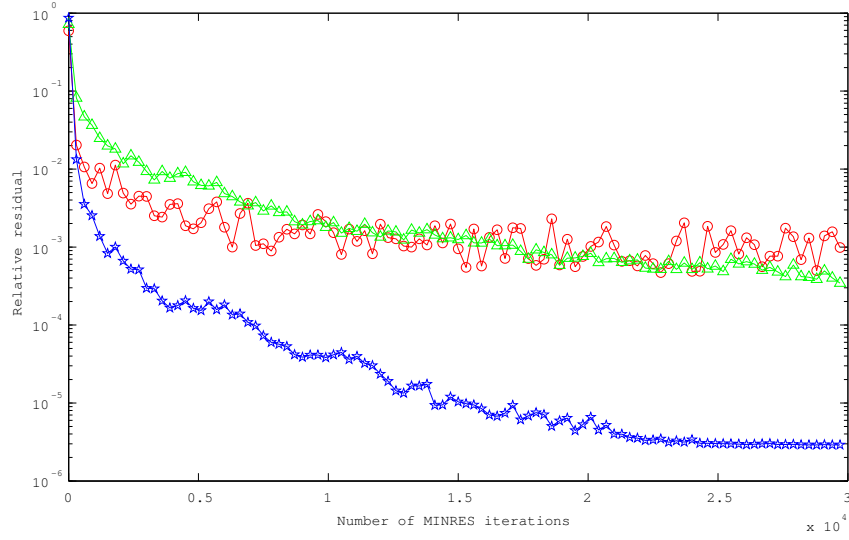


Fig. 11. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

また，E-SSOR 右前処理 MINRES を行列 bcsstk25，行列 bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に適用した場合，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ をそれぞれ 10^{-6} ， 10^{-5} 以下にするための計算結果を Table 12 に示す．

Table 12. Computation results for an inconsistent problem (Iter: number of iterations, Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm)

The values in () are the ratio compared to **bcsstk25**

Convergence criterion: $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-6}$ (**bcsstk25**), $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-5}$ (**bcsstk36**)

Matrix	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
bcsstk25	3,959	15.72	4.956
bcsstk36	14,273	148.86	38.48

inconsistent な連立一次方程式に対して E-SSOR 右前処理 MINRES 法はスケーリング 右前処理 MINRES 法，前処理なし MINRES 法と比較して収束性が優れており，重み付き 正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を係数行列が bcsstk25，bcsstk36 それぞれについ て 10^{-6} ， 10^{-5} 以下まで減少させた．さらに減少しないのは丸め誤差の影響によるものと 考えられるが，重み付き正規方程式の相対残差ノルムをより小さくするための手法なら びに，その手法による数値実験結果を次節で述べる．なお，Fig. 10，Fig. 11 において，

収束履歴の振動は inconsistent な系の場合，最小化している $\|\mathbf{r}_j\|_{M^{-1}}$ ではなく， $\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2$ を評価しているためと MINRES 法が 3 項間漸化式を使っているため，丸め誤差の影響で直交性が保たれないためと考えられる．以降で示す，inconsistent な系に対する収束履歴の振動は同様の理由である．

8. 数値実験・結果 (リスタート MINRES 法)

8.1 リスタートによる MINRES 法の精度の向上

通常 MINRES 法は三項漸化式を用いているので，GMRES 法のようにリスタートによる計算量の節約は必要ないのであるが，本節では，リスタートにより解の精度を向上させる (残差をより小さくできる) ことを示す．これは，MINRES 法をリスタートすることにより，丸め誤差によって失われている Krylov 基底の直交性 (線形独立性) を回復することにより，更に残差を減少させるものである．

7.4.2 節にて取り上げた，半正定値な行列 `bcsstk25`，`bcsstk36` を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に E-SSOR 右前処理 MINRES 法，スケーリング右前処理 MINRES 法 (初期ベクトルは $\mathbf{0}$) を適用した場合，Fig. 10，Fig. 11 が示すように，反復数を増やしても，途中から重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ をそれ以上小さくできなかった．

そこで，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を，より小さくできなくなった時点で得られた解 x_j (j は反復数) を初期ベクトルとして，あらためて E-SSOR 右前処理 MINRES 法，スケーリング右前処理 MINRES 法を 7.4.2 節にて取り上げた inconsistent な連立一次方程式に適用することを考える．

8.1.1 係数行列が `bcsstk25` である inconsistent な連立一次方程式の場合

ここでは，係数行列が `bcsstk25` である inconsistent な系に対し，今回の数値実験においてリスタートによる E-SSOR 右前処理 MINRES 法，スケーリング右前処理 MINRES 法の初期解を得るために必要なそれぞれの前処理付き反復法 (初期ベクトルは $\mathbf{0}$) の反復数ならびにその反復数での重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を Table 13 に示す．

Table 13. Iteration number for getting the initial guess for Restarted MINRES with preconditioning and $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ at that iteration number for **bcsstk25**

Method	Iteration number	$\frac{\ AM^{-1}\mathbf{r}_j\ _2}{\ AM^{-1}\mathbf{b}\ _2}$
MINRES with scaling right preconditioning	13,000	4.631×10^{-5}
MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,270	8.352×10^{-7}

次に，`bcsstk25` を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対して，E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 4,270 ステップで，スケーリング右前処理 MINRES 法を 13,000 ステップでリスタートした場合の重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 12，Fig. 13 に示す．

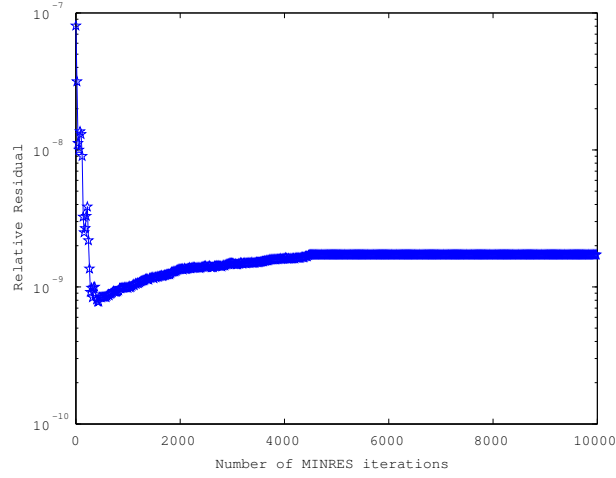


Fig. 12. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

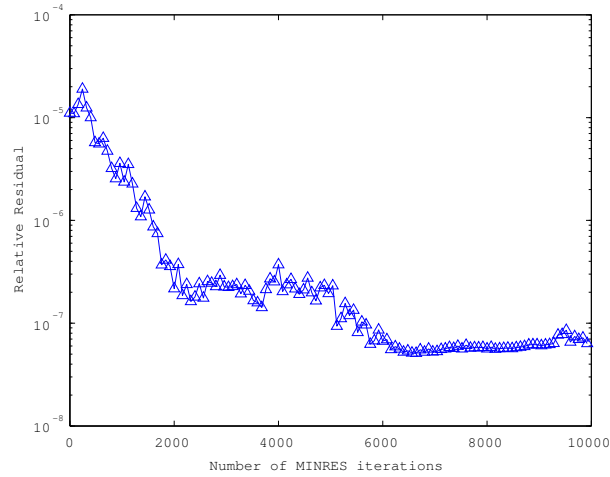


Fig. 13. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after restart for MINRES with scaling right preconditioning (△) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

Fig. 12, Fig. 13 からリスタートすることにより、重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を E-SSOR 右前処理 MINRES 法の場合、 10^{-9} 以下、スケーリング右前処理 MINRES 法の場合、 10^{-7} 以下にすることができ、残差をより小さくすることができた。

8.1.2 係数行列が bcsstk36 である inconsistent な連立一次方程式の場合

ここでは、係数行列が bcsstk36 である inconsistent な系に対し、今回の数値実験においてリスタートによる E-SSOR 右前処理 MINRES 法、スケーリング右前処理 MINRES 法の初期解を得るために必要なそれぞれの前処理付き反復法 (初期ベクトルは $\mathbf{0}$) の反復数な

らびにその反復数での重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を Table 14 に示す .

Table 14. Iteration number for getting the initial guess for Restarted MINRES with preconditioning and $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ at that iteration number for **bcstk36**

Method	Iteration number	$\frac{\ AM^{-1}\mathbf{r}_j\ _2}{\ AM^{-1}\mathbf{b}\ _2}$
MINRES with scaling right preconditioning	20,000	7.361×10^{-4}
MINRES with E-SSOR right preconditioning	20,000	6.733×10^{-6}

次に , **bcstk36** を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対して , E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 20,000 ステップでリスタートし , 20,000 ステップ反復し , さらにリスタートした場合の重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 14 , Fig. 15 に示す .

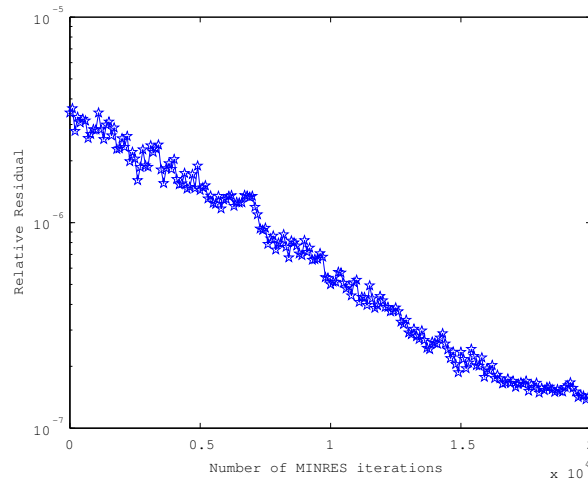


Fig. 14. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcstk36**)

Fig. 15 から E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 2 回リスタートすることにより , 重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-8} 以下にすることができ , 残差をより小さくすることができた .

さらに , 同じ inconsistent な系に対して , スケーリング右前処理 MINRES 法を 20,000 ステップでリスタートした場合の重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 16 に示す .

Fig. 16 から , **bcstk36** が係数行列である , inconsistent な系に対して , スケーリング右前処理 MINRES 法を適用した場合 , リスタートすることによって , 重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ をさほどより小さくすることはできなかった .

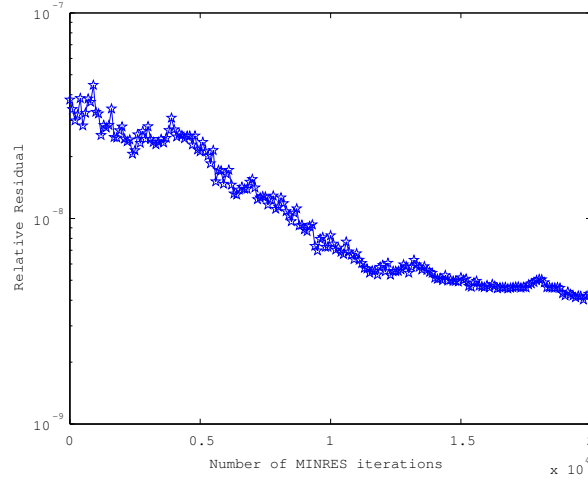


Fig. 15. $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. number of iterations after second restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

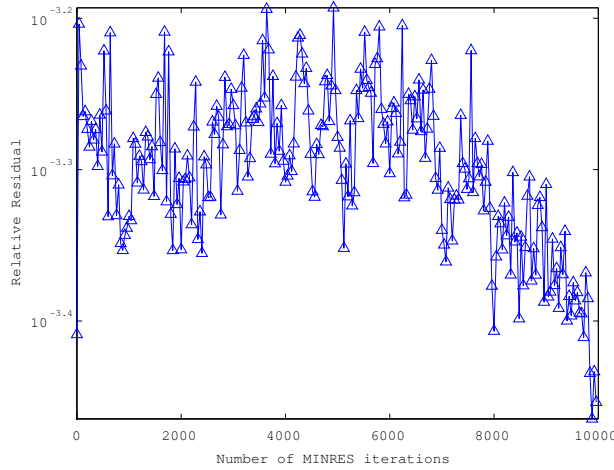


Fig. 16. $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. number of iterations after restart for MINRES with scaling right preconditioning (Δ) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

MINRES 法を自動的にリスタートする方式については 8.2 節で論じる .

8.2 MINRES 法を自動的にリスタートする方式

本節では , MINRES 法を自動的にリスタートする方式について論じる . 8.1 節で MINRES 法をリスタートすることにより , 残差を減少させることを提案したが , 問題となるのがどの反復数でリスタートするかである . この反復数を自動的に決める方式を検討する .

一つの手法として、小さな正の実数 ϵ を定めて、重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分

$$(8.1) \quad \frac{(\|AM^{-1}\mathbf{r}_k\|_2 - \|AM^{-1}\mathbf{r}_{k+m}\|_2)}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < \epsilon$$

を満たしたときの反復数 k の時点での解 \mathbf{x}_k を初期ベクトルとして、あらためて MINRES 法をリスタートする方式を検討する。

これは、重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ が振動するため、リスタートする反復数 k と $m+k$ 反復での重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分をとるのである。今回の数値実験では、 m を 20 とした。すなわち、20 反復ごとに重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分をとる。

係数行列が bcsstk25, bcsstk36 である inconsistent な系に対して、提案手法によってリスタートする反復数 k を決めて、E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートした結果を報告する。

行列 bcsstk25 の場合は、 ϵ の値を 10^{-8} としたところ、リスタートする反復数は 3,855 になった。行列 bcsstk36 の場合は、2 回リスタートを行い、 ϵ の値を 1 回目が 10^{-9} 、2 回目が 10^{-11} としたところ、リスタートする反復数は 16,154, 18,464 になった。すなわち行列 bcsstk36 の場合は、16,154 反復し、そのときの解を初期ベクトルとしてリスタートして更に 18,464 反復し、そのときの解を初期ベクトルとしてまたリスタートしている。

重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを行列 bcsstk25 の場合、Fig. 17 に、行列 bcsstk36 の場合、Fig. 18, Fig. 19 に示す。

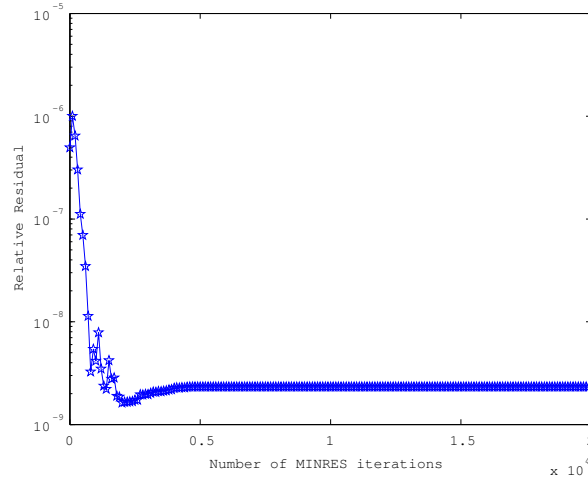


Fig. 17. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

ϵ や m の決め方は更なる検討を要するが、提案するような方式で自動的にリスタートできるものとする。

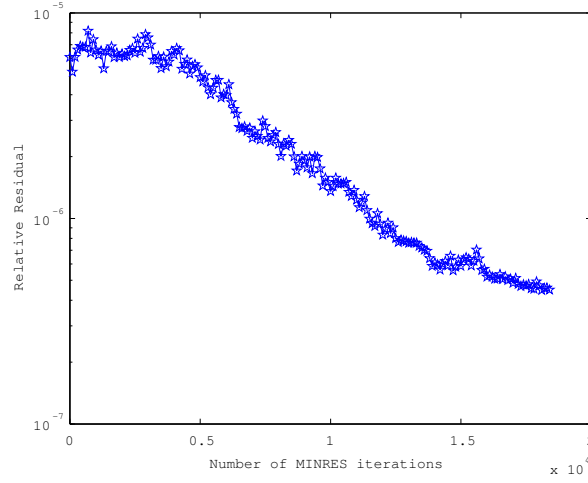


Fig. 18. $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. number of iterations after first automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

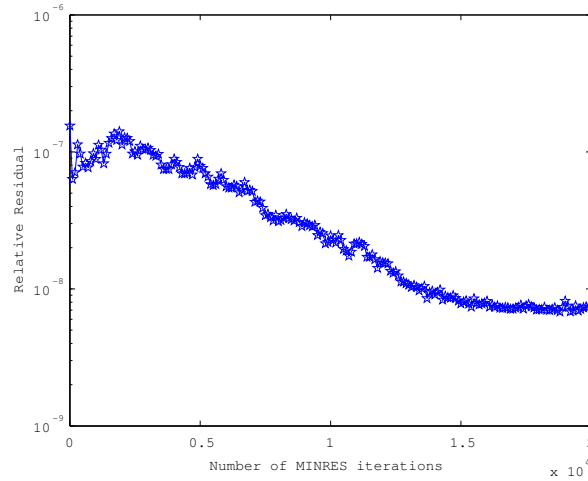


Fig. 19. $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. number of iterations after second automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

8.2.1 自動リスタート MINRES 法の計算時間

8.2 節で論じた MINRES 法を自動的にリスタートする方式にて，今回以下のように設定し，その CPU 時間を報告する．8.2 節の式 (8.1) において，8.2 節同様， m を 20 とした．本節の数値実験では，1, 21, 41, ..., ステップと最初を 1 ステップ目として，20 反復毎に重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分をとる．係数行列が **bcsstk25** である inconsistent な系では $\epsilon = 10^{-9}$ としたとき，リスタートする反復数 k は 4,261 ステップになり，さらに 4,261 ステップでの解を初期解としてリスタートし，4,261 ステップ目を初

期ステップとして 20 反復ごとに重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分をとったところ, 1 回目のリスタートステップ数は 375 ステップにて, 重み付き正規方程式の相対残差ノルムに関し, $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-9}$ を満たした.

この場合の, CPU 時間を Table 15 に示す.

Table 15. Computation results for an inconsistent problem for **bcsstk25** (Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm, Iter: number of iterations) Iteration number for getting the initial guess for Restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning

Convergence criterion : $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2} < 10^{-9}$ (**bcsstk25**)

Method	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,261	5.622	5.656
1st auto restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	375	0.478	0.434
Total of auto restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,636	6.1	6.09

リスタートするステップ数 4,261 を求める際の CPU 時間にて, 20 回に 1 回重み付き正規方程式の相対残差ノルムの計算時間を含めた Tres よりその計算時間を含まない Tno が大きいのは計測誤差の範囲である.

E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 4,261 ステップ反復し, その解を初期解としてリスタートしたときの重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを, Fig. 20 に示す.

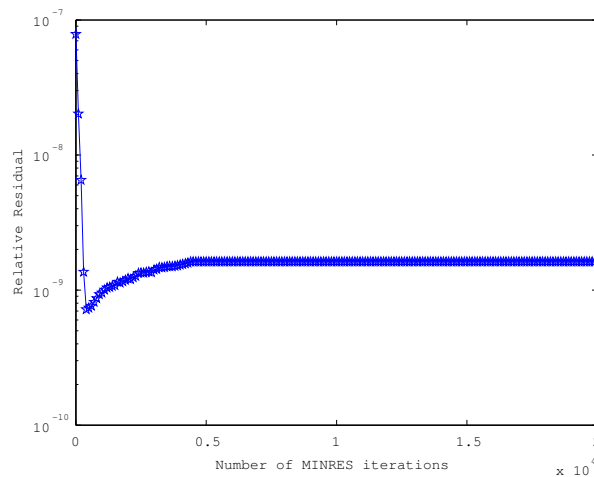


Fig. 20. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after first automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

Fig. 20 と Fig. 17 を比較すると，前者がリスタートするステップ数を決める反復回数を要しているため，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ をより小さくでき，Fig. 12 同様， 10^{-9} より小さくできている．

次に，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しても同様の手法でリスタートするステップ数を決めた場合の数値実験結果を報告する．なお，bcsstk36 の場合は，8.1.2 節ならびに 8.2 節にて報告したように， $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ を 10^{-8} 以下にするためには 2 回リスタート計算をする必要がある．係数行列が bcsstk25 である inconsistent な系の場合同様に，1, 21, 41, ..., ステップと最初を 1 ステップ目として，20 反復毎に重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分をとる．係数行列が bcsstk36 である inconsistent な系でもまず $\epsilon = 10^{-9}$ としたとき，リスタートする反復数 k は 25,541 ステップになる．さらに 25,541 ステップでの解を初期解としてリスタートする．次に $\epsilon = 10^{-11}$ としたとき，さらに 17,001 ステップ目にて 20 反復毎に計算した重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分は 10^{-11} 未満になる．この 1 回目のリスタート計算の 17,001 ステップ目の解を初期解として 2 回目のリスタート計算し，4,766 ステップにて重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ を 10^{-8} より小さくできた．

この場合の，CPU 時間を Table 16 に示す．

Table 16. Computation results for an inconsistent problem for **bcsstk36** (Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm, Iter: number of iterations) Iteration number for getting the initial guess for Restarted MINRES with preconditioning and $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ at that iteration number for **bcsstk36**

Method	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
MINRES with E-SSOR right preconditioning	25,541	78.24	76.25
1st auto restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	17,001	52.08	52.17
2nd auto restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,766	14.55	12.75
Total of auto restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	47,308	144.87	141.17

1 回目のリスタートするステップ数 25,541 を求める際の CPU 時間にて，20 回に 1 回重み付き正規方程式の相対残差ノルムの計算時間を含めた Tres よりその計算時間を含まない Tno が大きいのは計測誤差の範囲である．

E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 25,541 ステップ反復し，その解を初期解としてリスタートしたときの重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. 反復数のグラフを，Fig. 21，さらに 1 回目のリスタート計算を 17,001 ステップ反復し，その解を初期解としてリスタートしたときの重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ vs. 反復数のグラフを，Fig. 22 に示す．

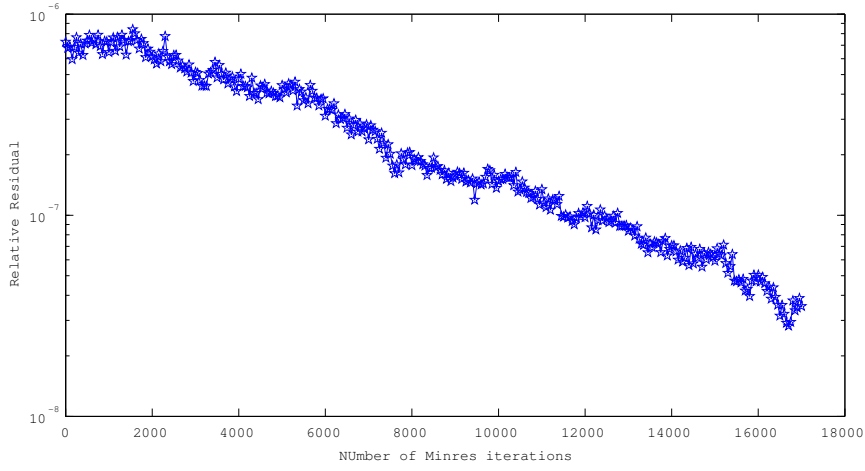


Fig. 21. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after first automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

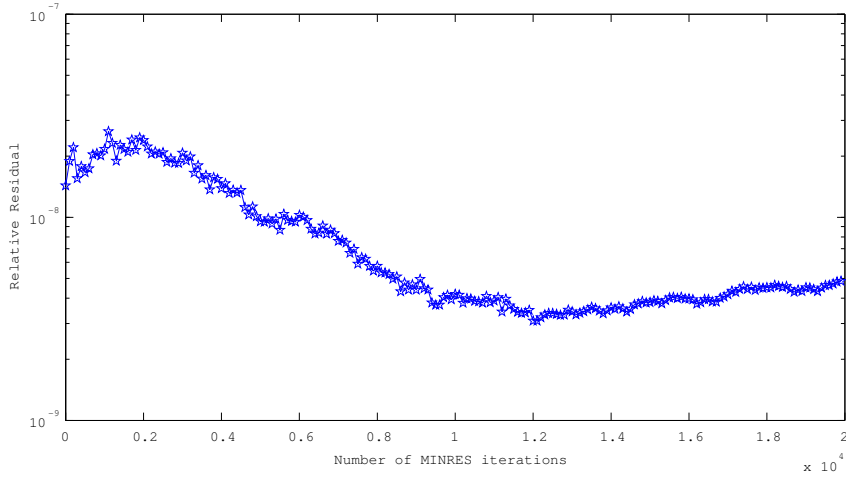


Fig. 22. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after second automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

Fig. 22 と Fig. 19 を比較すると, Fig. 15 同様, 重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ は 10^{-8} より小さくできている.

もともと MINRES 法をリスタートするのは, (8.1) 節にて論じたように, 反復数を増やしても, 途中から重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ をそれ以上小さくできないため, そのときの解を初期解としてリスタートしていた. したがって, 係数行列が **bcsstk25**, **bcsstk36** である inconsistent な系に対し, 本節で提案するリスタートするステップ数を決める手法は効果があり, Table 15, Table 16 で示した CPU 時間を見る限り, 重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ の差分を 20 ステップに 1 回なら, 差分計

算の負荷は小さかった．

重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ の値のみをみて判断する方式であると，係数行列 A が特異であり，かつ inconsistent な系であるがために重み付き正規方程式の相対残差 $\frac{\|AM^{-1}r_j\|_2}{\|AM^{-1}b\|_2}$ をどこまで小さくできるか見込むのが難しいがために，リスタートするステップ数を効率よく決められない．それに対し， ϵ の値の決め方については今後解決すべき課題として残るが，本節で提案する重み付き正規方程式の相対残差ノルムの差分を評価することにより，リスタートするステップ数を決めるという MINRES 法を自動的にリスタートする方式の有効性を，CPU 時間や重み付き正規方程式の相対残差ノルムの履歴から示した．

9. Inconsistent な系に対する E-SSOR 右前処理 MINRES 法の解の精度

本章では, 係数行列が半正定値かつ inconsistent な系に対し, E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用した場合, 前処理に依存しない残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を報告する. 数値実験に用いた inconsistent な系は 7.3 節と 7.4 節と同じである.

目的は, 係数行列が半正定値かつ inconsistent な系に対して, E-SSOR 右前処理 MINRES 法を含めた, 右前処理 MINRES 法の収束判定を定理 5.6, 命題 5.8, 5.4 節から $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{v}^{(1)}\|_2}$ に基づき得られた解に対し, 前処理に依存しない残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を計算し, 解の精度を判定することである.

9.1 係数行列が bcsstk25, bcsstk36 である inconsistent な系に対する解の精度

係数行列が bcsstk25, bcsstk36 である inconsistent な系に対して E-SSOR 右前処理 MINRES 法, スケーリング右前処理 MINRES 法, 前処理なし MINRES 法を適用した場合, $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフをそれぞれ Fig. 23, Fig. 24 に示す. なお, 加速パラメータは 1.0 とした.

さらに, 各行列の inconsistent な系に対し, 8.1 節で提案したリスタート計算を行った. 具体的には行列 bcsstk25 の場合は E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 4,270 ステップ, スケーリング右前処理 MINRES 法を 13,792 ステップ, 前処理なし MINRES 法を 1,725 ステップでリスタートした. 一方, 行列 bcsstk36 の場合は E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 20,000 ステップでリスタートし, 20,000 ステップ反復し, さらにリスタートする. これは 8.1 節と同様のリスタート計算である. スケーリング右前処理 MINRES 法を 7,519 ステップでリスタートし, 20,000 ステップ反復し, さらにリスタートする. 前処理なし MINRES 法は 3,846 ステップでリスタートし, 20,000 ステップ反復し, さらにリスタートした.

係数行列が bcsstk25, bcsstk36 である場合に対し, 1 回目のリスタートをして 20,000 反復した場合の 3 つの手法の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフをそれぞれ Fig. 25, Fig. 26 に示す.

また係数行列が bcsstk36 である場合に対し, 2 回目のリスタートをして 20,000 反復した場合の 3 つの手法の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 27 に示す.

E-SSOR 右前処理 MINRES 法を行列 bcsstk25 の場合は 1 回リスタート, 行列 bcsstk36 の場合は 2 回リスタートすることにより, Fig. 25, Fig. 27 からそれぞれ正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-10} , 10^{-6} 以下にすることはできた.

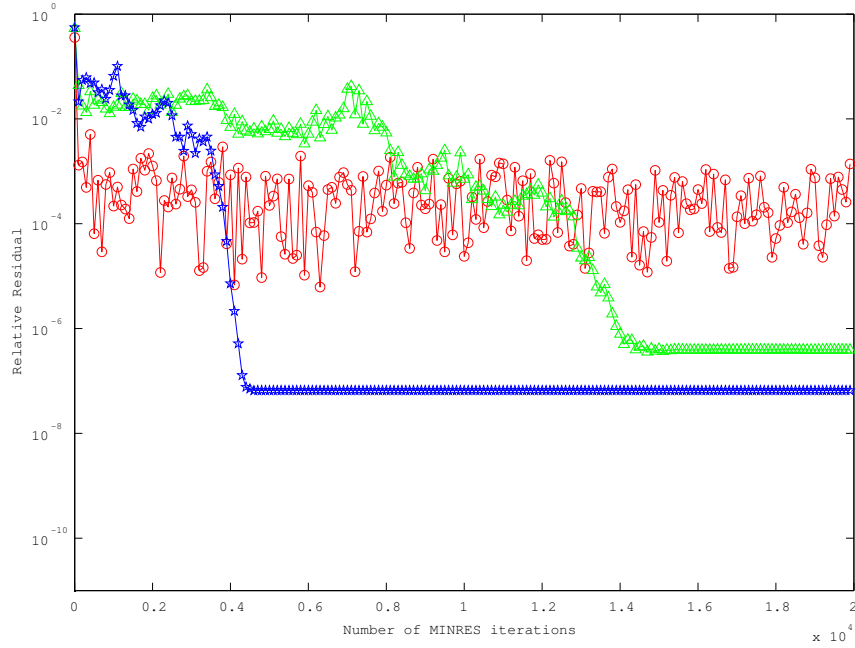


Fig. 23. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

行列 **bcsstk25** の場合は正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートする手法により，十分小さくできたが，行列 **bcsstk36** の場合は倍精度演算であることを考慮すると十分な収束とはいえないが， 10^{-6} 以下という精度の解を与えることができた．

そこで行列 **bcsstk36** の場合には，2 回目のリスタートを 20,000 反復したときの解を初期解として 3 回目のリスタートを 20,000 反復し，さらにそのときの解を初期解として 20,000 反復したときの正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを 3 回目のリスタートの場合については Fig. 28，4 回目のリスタートの場合については Fig. 29 に示す．

正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値は，Fig. 28 から 3 回目のリスタート計算において 9,111 ステップ目で 9.89×10^{-8} と 10^{-7} 未満になり，Fig. 29 から 4 回目のリスタート計算において 5 ステップ目で 9.93×10^{-9} と 10^{-8} 未満になり，リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法は 4 回のリスタートを行えば，**bcsstk36** を係数行列とする inconsistent な系に対して，倍精度演算の意味でも十分な精度の解を得ることができた．

前処理付き MINRES 法は，係数行列が正則，特異いづれに関わらず，右前処理，左前処理や両側前処理いずれの場合も必ずしも 2 乗ノルムでの残差ノルムを最小化しているのではないので，正規方程式の相対残差ノルムを十分に小さくできないことは inconsistent

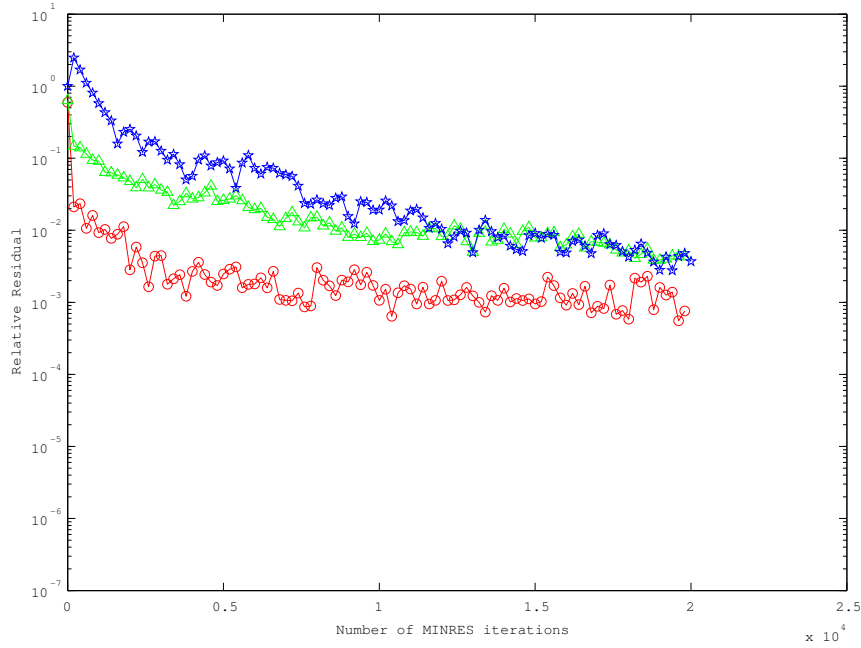


Fig. 24. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

な系ではあり得る．

inconsistent な系に対して，前処理なし MINRES 法は行列 M が単位行列なので，正規方程式 $A\mathbf{r} = \mathbf{0}$ を解いているが，7.4.2 節にある Fig. 10，Fig. 11 から，収束が十分ではなかった．さらにリスタート計算を用いても，Fig. 25，Fig. 27 から正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を十分小さくすることができず，リスタート計算を用いても前処理なし MINRES 法は有効ではなかった．そこで，定理 5.6，命題 5.8 より $\|M^{-\frac{1}{2}}\mathbf{r}\|_2$ を最小化する解（これは重み付き正規方程式 $AM^{-1}\mathbf{r} = \mathbf{0}$ の解と同じ）を解の候補の一つであると考えた．そして前処理として，今回提案した E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートさせることにより，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を小さくすることができた．

9.2 自動リスタート MINRES 法の性能

係数行列が半正定値行列 bcsstk25，bcsstk36 かつ inconsistent な系に対して，8.1 節で提案した MINRES 法をリスタートすることにより，E-SSOR 右前処理 MINRES 法は，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を小さくすることができ，かつ 9.1 節で報告したように，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を，係数行列 bcsstk25 の場合には 10^{-10} 以下に，係数行列 bcsstk36 の場合には 10^{-6} 以下にすることはできた．

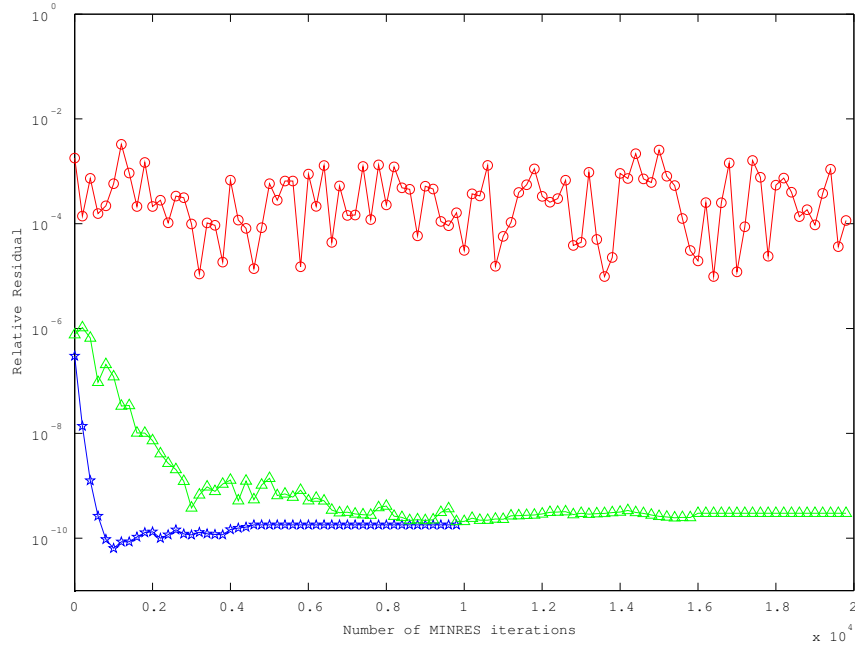


Fig. 25. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after restart for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

元の問題は，最小二乗問題 (1.2) を解くので (consistent な場合は，このノルムが 0 になるので，連立一次方程式 (1.1) を解くことになる)，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を小さくする必要がある．

まず，係数行列が半正定値行列 **bcsstk25** かつ inconsistent な系に対して，8.2.1 節で提案した自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用した際，4,261 ステップまでの正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 30，4,261 ステップでの解を初期解としてリスタートした 20,000 ステップまでの正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 31 に示す．

ここで，Fig. 31 での 375 ステップ目で，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値は 3.65×10^{-9} であり， 10^{-8} 以下になっている．

係数行列が半正定値行列 **bcsstk36** である inconsistent な系に対して，8.2.1 節で提案した自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用した際，25,541 ステップまでの正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 32，25,541 ステップでの解を初期解としてリスタートした 17,001 ステップまでの正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 33，さらに最初のリスタートの 17,001 ステップにて得られた解を初期解として 2 回目のリスタートをし，20,000 ステップまでの正規方程式の相対残

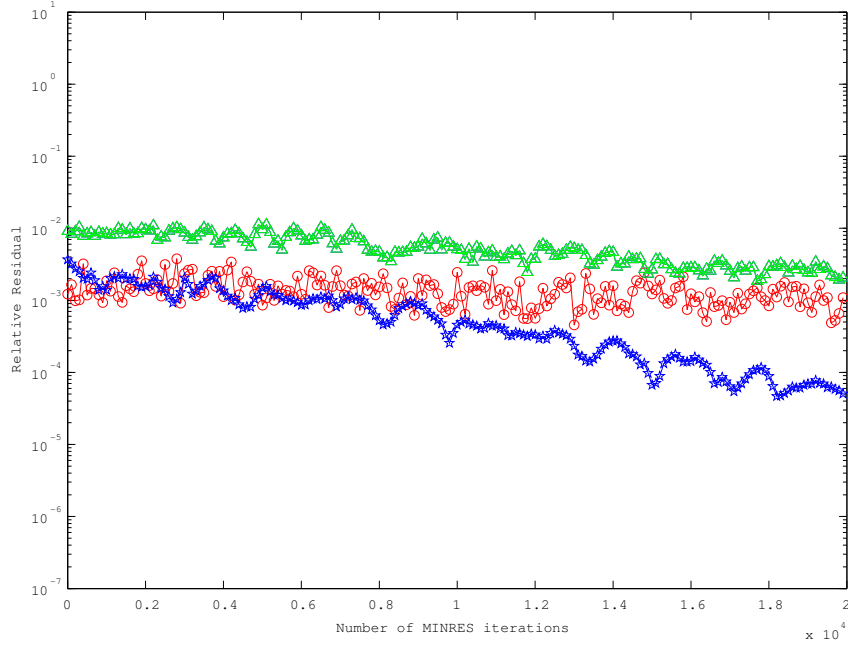


Fig. 26. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after restart for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (Δ), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem (**bcstk36**)

差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 34 に示す .

9.3 静磁場問題における inconsistent な系に対する解の精度

2.3 節にて説明した応用分野 3 の静磁場問題から生じる inconsistent な系を直接解くことを本論文では考えており , その数値実験結果を 7.3 節で述べた . しかしながら , Fig. 7 は , 重み付き正規方程式の相対残差 $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示している .

本節では , 正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 35 に示す . \circ が前処理なし MINRES 法 , Δ がスケーリング右前処理 MINRES 法 , \star が E-SSOR 右前処理 MINRES 法を表す .

正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-7} 以下にするという判定条件であれば , 51 ステップ目で E-SSOR 右前処理 MINRES 法は収束し , スケーリング右前処理 MINRES 法や前処理なし MINRES 法より速く収束する .

しかしながら , リスタート計算を用いても , E-SSOR 右前処理 MINRES 法については正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-8} 以下にはできなかった . 一方で正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を最も小さくでき , 10^{-11} 以下にできたのは前処理なし MINRES

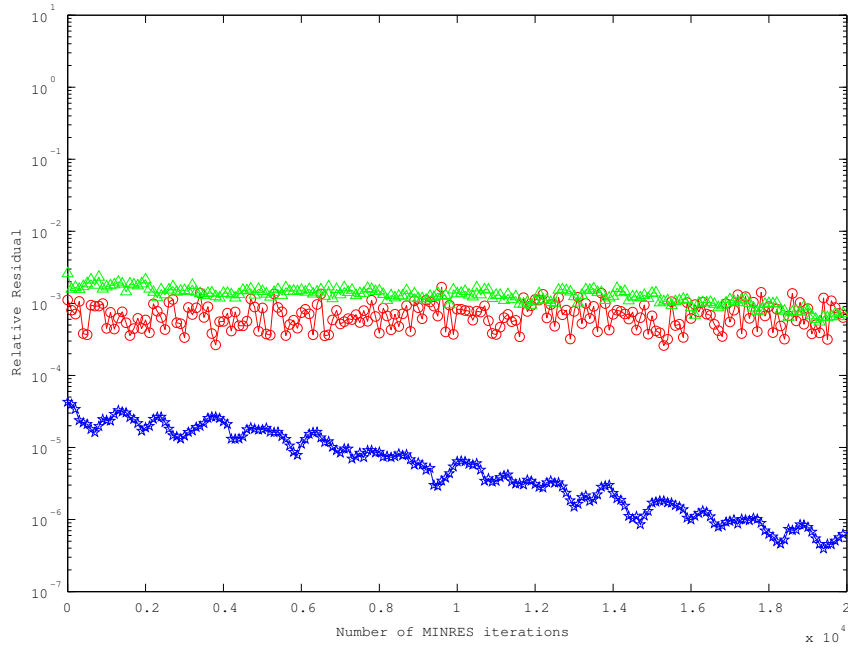


Fig. 27. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after second restart for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (\triangle), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

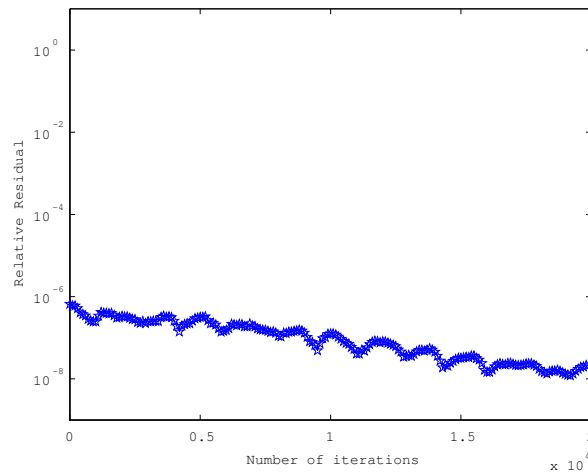


Fig. 28. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after 3rd restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

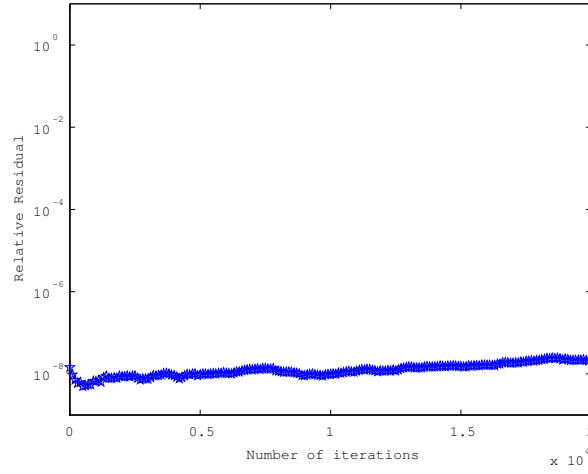


Fig. 29. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after 4th restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

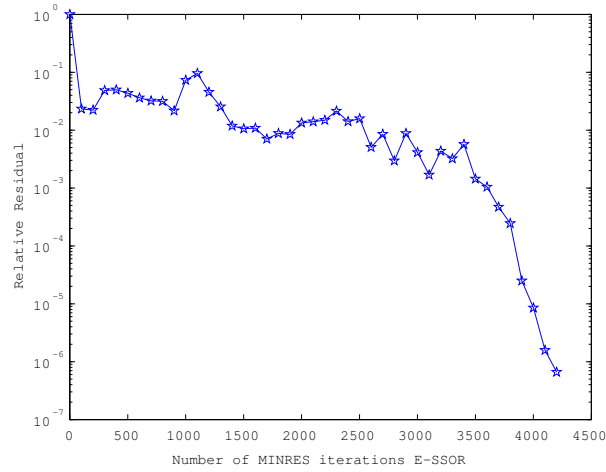


Fig. 30. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

法であった．前処理なし MINRES 法は正規方程式 $A\mathbf{r} = \mathbf{0}$ (\mathbf{r} は残差ベクトル) を解いている．一方，右前処理 MINRES 法は重み付き正規方程式 $AM^{-1}\mathbf{r} = \mathbf{0}$ を解いているので，リスタート計算を用いても E-SSOR 右前処理 MINRES 法の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ が十分小さくはならない事例はありえ，今回扱った静磁場問題の一例である inconsistent な系の行列，右辺ベクトルデータはその事例であった．この静磁場問題では正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-7} 以下にする精度の解を求めるという意味では E-SSOR 右前処理 MINRES 法は有効であると言える．

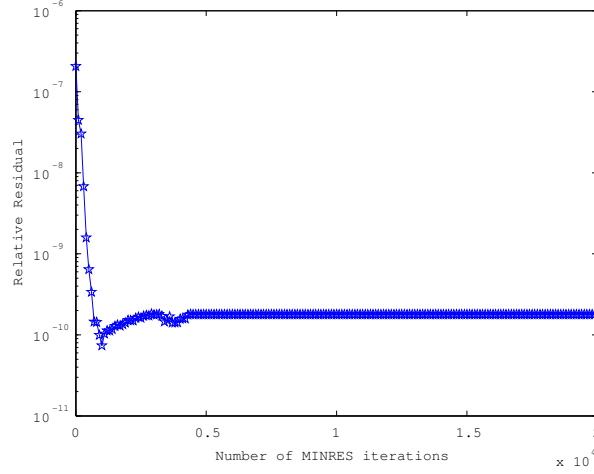


Fig. 31. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

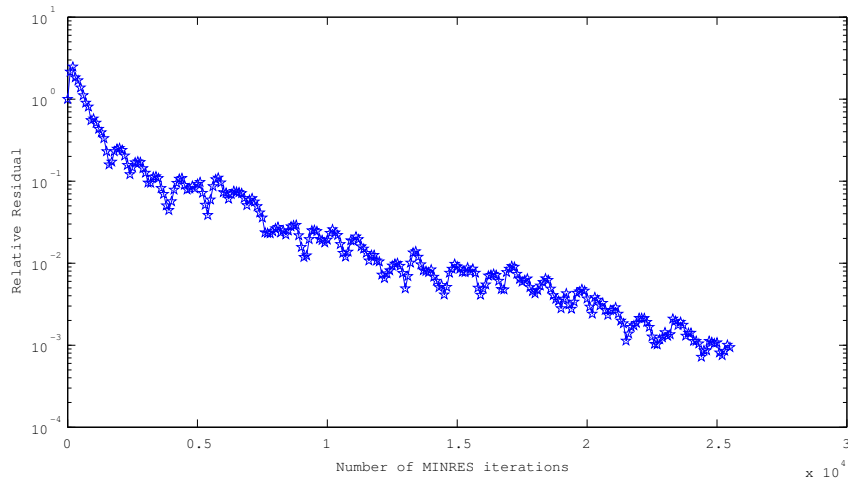


Fig. 32. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

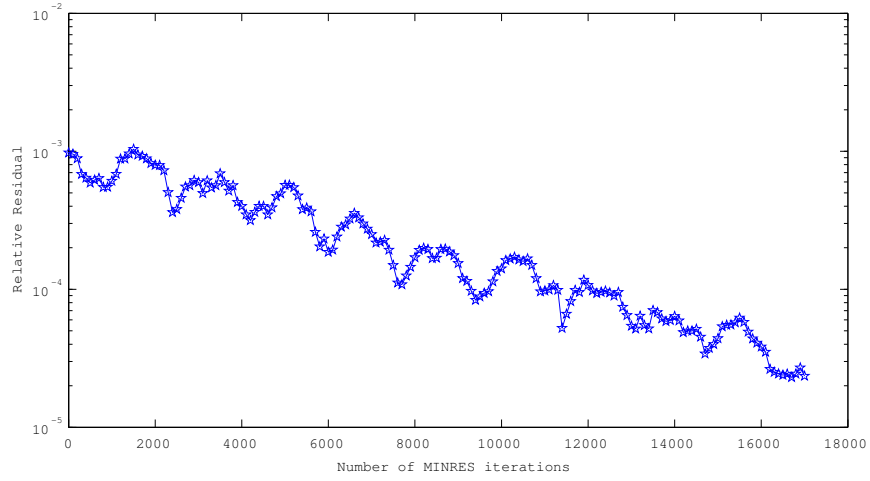


Fig. 33. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after first automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

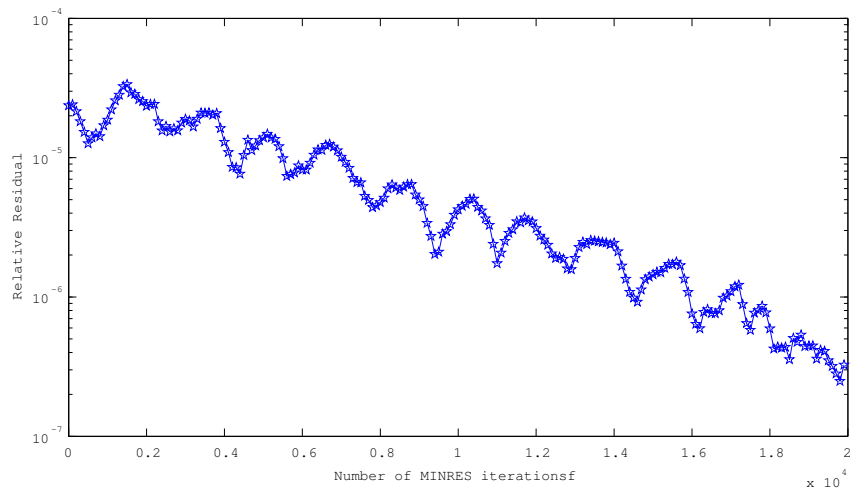


Fig. 34. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after second automatic restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

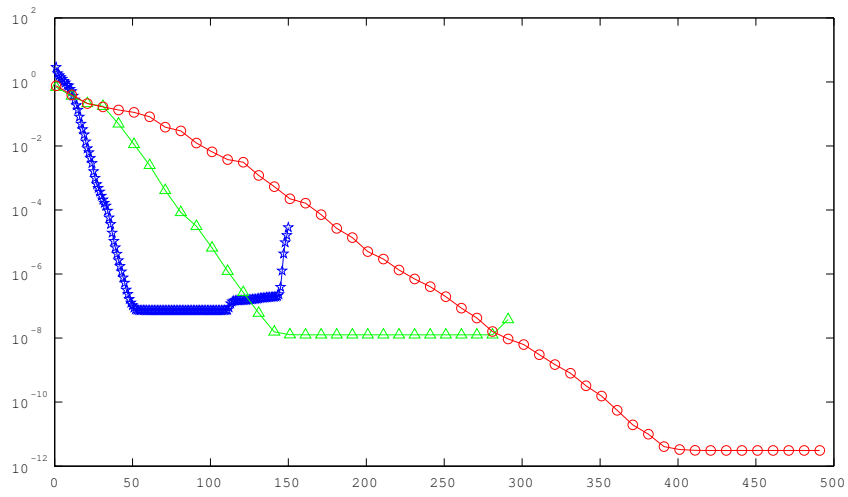


Fig. 35. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES without preconditioning (\circ), MINRES with scaling right preconditioning (\triangle), and MINRES with E-SSOR right preconditioning (\star) for an inconsistent problem

10. まとめ

対称特異な係数行列をもつ連立一次方程式に対して, inconsistent な場合にも残差の二乗ノルムを最小とする解を与える MINRES 法を採用し, 今回の研究では右前処理 MINRES 法の定式化を行った.

数値誤差を考慮しない理論上は, 右前処理 MINRES 法は正則な系だけでなく, 特異系に対しても, 任意の右辺ベクトル, 任意の初期ベクトルに対して, 前処理行列に関するノルムの意味で残差ノルムが最小となる解に破綻することなく収束することを証明した. 特に, consistent な系の場合, 初期ベクトルを係数行列に対して右前処理した行列の値域に入るようにとれば, 前処理行列に関するノルムでの最小ノルム解に収束することも証明した.

さらに, 前処理として, CG 法の両側前処理の計算量を削減するのに用いられる Eisenstat's trick を SSOR 右前処理に適用した MINRES 法 (E-SSOR 右前処理 MINRES 法) を提案した.

数値実験では 3 つの半正定値行列を係数行列とする consistent な連立一次方程式に E-SSOR 右前処理を適用したところ, スケーリング右前処理 MINRES 法より速く収束した. また, inconsistent な連立一次方程式については, 一つの行列については E-SSOR 右前処理 MINRES 法はスケーリング右前処理 MINRES 法より速く収束することを確認し, 数値実験に用いた全ての inconsistent な系に対しては, 重み付き正規方程式の相対残差ノルムをより小さくすることができた.

さらに E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートすることにより, inconsistent な系に対して重み付き正規方程式の相対残差ノルムをさらに小さくすることができることを示した. 同時に正規方程式の相対残差ノルムも E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートすることにより, 小さくできる事例を確認でき, 元の最小二乗問題 (1.2) を解く意味で前処理に依存しない, 正規方程式の相対残差ノルムで評価した場合, 精度のよい解を得ることができた. 一方でリスタートを用いても, 今回扱った静磁場問題における inconsistent な連立一次方程式の事例に対しては, E-SSOR 右前処理 MINRES 法による正規方程式の相対残差ノルムを 10^{-8} 以下にはできなかったが, 理論上はこういった事例はありえる. しかしながら, 正規方程式の相対残差ノルムを E-SSOR 右前処理 MINRES 法はリスタートを用いなくても 10^{-7} 以下にすることはできた.

11. 今後の研究課題

今後の研究課題としては、応用分野から現れる特異対称系、半正定値対称系に対して E-SSOR 右前処理 MINRES 法の実用性を数値実験によって検証することが挙げられる。まず提案した E-SSOR 右前処理 MINRES 法が半正定値対称系以外の特異対称系への数値実験による収束性の検証が挙がる。

提案した E-SSOR 右前処理 MINRES 法は本論文にて証明した定理より、丸め誤差による数値誤差を考慮しない理論の上では特異対称系に収束するので、半正定値系のみならず、不定値特異系に対して数値実験を行い、その収束性を検証する必要がある。応用分野として [42] で報告されている非圧縮流体を記述する Stokes 方程式を最小二乗型 Galerkin 安定化有限要素法で離散化して得られる系がある。

また今回扱った応用分野で扱った問題以外からの半正定値系の応用分野に対して E-SSOR 右前処理 MINRES 法の数値実験を行い、半正定値系に対して本手法の実用性を検証する必要がある。

さらに静磁場問題における inconsistent な系を E-SSOR 右前処理 MINRES 法で得られる解の物理的な妥当性を検証する。

次に右前処理 MINRES 法は特異系が inconsistent である場合、理論上は元の最小二乗問題を解く前処理なし MINRES 法と必ずしも等価でないことに対する考察が必要である。

9 章で論じたように、提案した E-SSOR 右前処理 MINRES 法は今回扱った係数行列が半正定値であり、inconsistent な系については正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を静磁場問題では 10^{-7} 以下に、7.4 節で扱った系についてはリスタート計算を用いれば、小さくすることはできた。しかしながら、9 章で論じたように右前処理 MINRES 法は理論の上では、重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を小さくする手法であり、これは正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を小さくすることとは必ずしも等価でない。

そこで丸め誤差による数値誤差を考慮しない理論上ならびに数値実験の上で、E-SSOR 右前処理 MINRES 法がリスタート計算を含め、正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を小さくできる場合はどのような条件であるか検証していく必要がある。

またリスタート計算もスケーリング右前処理法 MINRES では重み付き正規方程式の相対残差ノルムを小さくする意味でも有効ではなかったもので、リスタート計算が有効になる条件を理論上ならびに数値実験の上で検証する必要がある。

また今回 MINRES 法の収束性の改善という意味で前処理として E-SSOR 右前処理 MINRES 法を提案し、リスタート計算を用いたが、文献 [13], [20] が報告している部分再直交化が今回の研究で採用した MINRES 法に有効か否かを検証する。

また、既存研究との比較では MINRES-QLP 法と提案した E-SSOR 右前処理 MINRES 法ならびにそのリスタート法との比較において、MINRES-QLP 法の収束判定手法について調査、検証し、性能をあらためて比較する。

参考文献

- [1] Abe, K., and Zhang, S.-Z., A variable preconditioning using the SOR method for GCR-like methods, *Int. J. Numer. Anal. Model.*, **2**(2005), 147-161.
- [2] Aoto, D., Ishiwata, E., and Abe, K., A variable preconditioned GCR(m) method using the GSOR method for singular and rectangular linear systems, *J. Comput. Appl. Math.*, **234**(2010), 703–712.
- [3] Björck, A., *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [4] Calvetti, D., Lewis, B., and Reichel, L., On the choice of subspace for iterative methods for linear discrete ill-posed problems, *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.*, **11**, no.5(2011) 1069–1092.
- [5] Choi, S.C., Paige, C. C., and Saunders, M. A., MINRES-QLP: A Krylov subspace method for indefinite or singular symmetric systems, *PhD thesis*, ICME, Stanford University, 2006.
- [6] Choi, S.C., Paige, C. C., and Saunders, M. A., MINRES-QLP: A Krylov subspace method for indefinite or singular symmetric systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, **33**(2011) 1810–1836.
- [7] Choi, S.C., and Saunders, M. A., ALGORITHM 937: MINRES-QLP for Singular Symmetric and Hermitian Linear Equations and Least-Squares Problems, *ACM Trans. Math. Softw.*, **40**(2014) 12pp.
- [8] Davis, T.A., *The University of Florida Sparse Matrix Collection*, <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>.
- [9] Dax, A., The convergence of linear stationary iterative processes for solving singular unstructured systems of linear equations, *SIAM Review.*, **32**(1990), 611–635.
- [10] 電磁界解析の普及へ向けた高度利用技術の整理, 電気学会技術報告., 第 1317 号 (2014 年 9 月), 133–144.
- [11] Eisenstat, S. C., Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **2**(1981), 1–4.
- [12] Elman, H., Silvester, D., and Wathen A., *Finite Elements and Fast Iterative Solvers with Applications in Incompressible Fluid Dynamics*, Numerical Mathematics and Scientific Computation, Oxford University Press, 2005.
- [13] Fong, C., David., and Saunders, M., LSMR: An iterative algorithm for sparse least-squares problems, *SIAM J. Sci Comput.*, **33**(2011), 2950–2971.

- [14] Foster, L., *San Jose State University Singular Matrix Database*,
<http://www.math.sjsu.edu/singular/matrices/>.
- [15] 藤野清次, 阿部邦美, 杉原正顕, 中嶋徳正, 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.
- [16] Greenbaum, A., *Iterative Methods for Solving Linear Systems.*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987.
- [17] Martin, H., *Conjugate Gradient Type Methods for Ill-Posed Problems.*, Longman Scientific & Technical, 1995.
- [18] Hayami, K. and Yin, J.-F., On the Convergence of Krylov Subspace Methods for Rank-Deficient Least Squares Problems, (Invited talk), The Third International Conference on Scientific Computing and Partial Differential Equations (SCPDE08), Hong Kong Baptist University, December, 2008.
- [19] Hayami, K., Sugihara, M., and Yin, J.-F., A Geometric View of Krylov Subspace Methods on Singular Systems, *SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Monterey, CA.*, October 26–29, 2009.
- [20] Hayami, K., Yin, J.-F., and Ito, T., GMRES methods for least squares problems, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **31**(2010), 2400–2430.
- [21] Hayami, K., and Sugihara, M., A geometric view of Krylov subspace methods on singular systems, *Numerical Linear Algebra with Applications.*, **18**(2011), 449–469.
- [22] Hestene, Magnus R., and Stiefel, E., Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, *Journal of Research of the National Bureau of Standards.*, **49**, (6), December, 1952.
- [23] Igarashi, H., On the Property of the Curl-Curl matrix in Finite Element Analysis with Edge Elements, *IEEE Trans. Magn.*, **37**, no. 5(2001), 3129–3132.
- [24] Igarashi, H., and Honma, T., On convergence of ICCG applied to finite element equation for quasi-static fields, *IEEE Trans. Magn.*, **38**(2002), 565–568.
- [25] Imakura, A., Sakurai, T., Sumiyoshi, K., and Matsufuru., H., An auto-tuning technique of the weighted Jacobi-type Iteration used for preconditioners of Krylov subspace methods, *IEEE 6th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoS-12)*, (2012), 183–190
- [26] Imakura, A., Sakurai, T., Sumiyoshi, K., and Matsufuru., H., A parameter optimization technique for a weighted Jacobi-type preconditioner, *JSIAM Letters*, **4**(2012), 41–44.
- [27] Kaasschieter, E. F., Preconditioned conjugate gradients for solving singular systems, *J. Comput. Appl. Math.*, **24**(1988), 265–275.

- [28] Meijerink, J.A., and van der Vorst, H. A., An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix, *Math. Comp.*, **31**(1977), 148–162.
- [29] Morikuni, K., and Hayami, K., Inner-iteration Krylov subspace methods for least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, **34**(2013), 1–22
- [30] Paige, C. C., and Saunders, M. A., Solution of sparse indefinite systems of linear equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **12**(1975), 617–629.
- [31] Rao, C. R., *Linear Statistical Inference and its Applications. Second edition*, John Wiley Sons, Inc., 1973.
- [32] Rao, C. R. 著, 奥田忠一 他訳, 統計的推測とその応用, 東京図書, 1977.
- [33] Saad, Y., *Iterative methods for sparse linear systems. 2nd edition*, SIAM, Philadelphia, PA, 2003.
- [34] Saad, Y., and Schultz, M. H., GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7**(1986), 856–869.
- [35] 杉原光太, 速水 謙, 実対称半正定値線形方程式への MINRES 法と GMRES 法の適用について, 日本応用数理学会, 環瀬戸内応用数理研究部会, 第 18 回シンポジウム, 加計学園国際学術センター, 倉敷, 2014 年 12 月 5 日–6 日.
- [36] Sugihara, K., and Hayami, K., Right preconditioned MINRES for singular linear systems, International Workshop on Information Technology, Applied Mathematics and Science (IMS2015), 「情報技術, 応用数学そして科学に関する国際ワークショップ (IMS2015)」, 京都市生涯学習総合センター, 2015 年 3 月 26 日–28 日.
- [37] 杉原光太, 速水 謙, 半正定値系に対する Eisenstat SSOR による右前処理 MINRES 法, 日本応用数理学会, 2015 年度年会 3 部会連携, 「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 金沢大学角間キャンパス, 金沢, 2015 年 9 月 9 日–11 日.
- [38] Sugihara, K., Hayami, K., and Zheng, N., Right Preconditioned MINRES using Eisenstat-SSOR for Positive Semidefinite Systems, Contributed Paper in CP14: Preconditioning Methods, 2015 SIAM Conference on Applied Linear Algebra, October 26–30th, 2015, Atlanta, Georgia.
- [39] 杉原光太, 速水 謙, Ning Zheng, 半正定値系に対する Eisenstat SSOR による右前処理 MINRES 法, 日本応用数理学会論文誌, Vol.26, No.2, 2016, pp.124–166.
- [40] 杉原光太, 速水 謙, Ning Zheng, 半正定値系に対する Eisenstat SSOR による右前処理 MINRES 法と, 特異系への右前処理 MINRES 法の収束性, 日本応用数理学会, 2016 年 研究部会連合発表会, 「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 神戸学院

大学 ポートアイランドキャンパス, 神戸, 2016 年 3 月 4 日–5 日.

[41] 杉原正顕, 室田一雄, 線形計算の数理, 岩波書店, 東京, 2009.

[42] 鈴木 厚, 有限要素離散化 Stokes 方程式に対する反復解法, 数理解析研究所講究録, 1084 巻 (1999 年), 103–110 .

[43] van der Vorst, H. A., *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*, Cambridge University Press, New York, NY, 2003.

本付録では，3 章の関連研究における 3.1 節の Kyrlov 部分空間法のアルゴリズムを示す．

また本付録では，数値実験により半正定値系に対して，前処理なし MINRES 法やスケーリング右前処理 MINRES 法と比較し，有効であることを示した E-SSOR 右前処理 MINRES 法を他の反復法と比較することを目的とした数値実験結果を報告する．

具体的には GMRES 法，MINRES-QLP 法，MR-2 法ならびに RRMR 法と E-SSOR 右前処理 MINRES 法を正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値により，性能比較をする．

付録. 1. CG 法のアルゴリズム

CG 法のアルゴリズムを Algorithm 6 に示す．

Algorithm 6 : CG method

1. Choose initial approximate solution $\mathbf{x}^{(0)}$
 - 2: Compute $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$, $\mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{r}^{(0)}$
 - 3: for $j = 0$ until convergence do
 - 4: $\alpha_j = (\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(j)}) / (A\mathbf{p}^{(j)}, \mathbf{p}^{(j)})$
 - 5 : $\mathbf{x}^{(j+1)} = \mathbf{x}^{(j)} + \alpha_j \mathbf{p}^{(j)}$
 - 6 : $\mathbf{r}^{(j+1)} = \mathbf{r}^{(j)} - \alpha_j A\mathbf{p}^{(j)}$
 - 7: check convergence
 - 8: $\beta_j = (\mathbf{r}^{(j+1)}, \mathbf{r}^{(j+1)}) / (\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{r}^{(j)})$
 - 9: $\mathbf{p}^{(j+1)} = \mathbf{r}^{(j+1)} + \beta_j \mathbf{p}^{(j)}$
 - 19: end do
-

付録. 2. GMRES 法のアゴリズム

GMRES 法のアゴリズムを **Algorithm 7** に示す . ここで , 行列 $\tilde{H}_k \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$ は

Algorithm 7 : GMRES method

1. Choose initial approximate solution $\mathbf{x}^{(0)}$
 - 2: Compute $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$, $\beta = \|\mathbf{r}^{(0)}\|_2$, $\mathbf{v}_1 = \mathbf{r}^{(0)}/\beta$
 - 3: for $j = 0$ until convergence do
 - 4: $\mathbf{w}^{(j)} = A\mathbf{v}^{(j)}$
 - 5: for $i = 1, 2, \dots, j$
 - 6: $h_{i,j} = (\mathbf{w}^{(j)}, \mathbf{v}^{(i)})$, $\mathbf{w}^{(j)} = \mathbf{w}^{(j)} - h_{i,j}\mathbf{v}^{(i)}$
 - 7: end do
 - 8: $h_{j+1,j} = \|\mathbf{w}^{(j)}\|_2$. If $h_{j+1,j} = 0$, goto line 11.
 - 9: $\mathbf{v}^{(j+1)} = \mathbf{w}^{(j)}/h_{j+1,j}$
 - 10: end do
 - 11: k: = j
 - 12: Form the approximate solution $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + [\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(k)}]\mathbf{y}_k$
where $\mathbf{y} = \mathbf{y}_k$ minimizes $\|\mathbf{r}_k\|_2 = \|\beta\mathbf{e}_1 - \tilde{H}_k\mathbf{y}\|_2$.
-

Hessenberg 行列である . また , $\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^{(k+1)}$ である .

付録. 3. 自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法と GMRES 法の比較

8.1 節ならびに 8.2.1 節で提案した自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法と GMRES 法の性能を比較する。

比較する目的は，リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法の収束に影響があった丸め誤差に GMRES 法は MINRES 法に比べ，強いため，GMRES 法がリスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法に比べ，収束性がよいか検証することである。

特異系に前処理付き GMRES 法を適用する場合には，5.1 節の議論から右前処理の場合，前処理行列が正則であれば問題の等価性が保たれる．そこで，今回は右前処理 GMRES 法ならびに前処理なし GMRES 法を係数行列が bcsstk25，bcsstk36 である inconsistent な系に適用する。

まず係数行列が bcsstk25 である inconsistent な系に対して，SSOR 右前処理 GMRES 法と SOR 右前処理 GMRES 法 (いずれも内部反復数は 1 であり，加速パラメータは 1.0) を適用した場合，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-8} 以下を収束判定条件としたときの CPU 時間を Table 17 に示す。

Table 17. Computation results of GMRES with SOR and SSOR right preconditioning for an inconsistent problem for **bcsstk25** (Iter: number of iterations, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm)

Convergence criterion: $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-8}$ (**bcsstk25**)

Method	Iter	Tno [sec]
GMRES with SOR right preconditioning	4,471	944.6
GMRES with SSOR right preconditioning	3,616	556.5

bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式については，自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用した場合，Fig. 31 での 375 ステップ目で，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値は 3.65×10^{-9} であり， 10^{-8} 以下になっている．したがって，bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式については，自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法は 4,261 ステップまで反復し，さらに 4,261 ステップ目の解を初期解としてリスタートしたとき 375 ステップで $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-8}$ を達成できる．よって $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-8}$ を収束判定条件とした場合にも Table 15 と同じ値の反復数ならびに CPU 時間を要し，それをあらためて Table 18 として示す。

bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対し， $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-8}$ を収束判定条件としたとき，自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法の CPU 時間を示す

Table 18. Computation results for an inconsistent problem for **bcstk25** (Tres: computation time including the computation of the relative residual norm, Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm, Iter: number of iterations)
Iteration number for getting the initial guess for Restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning
Convergence criterion : $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-8}$ (**bcstk25**)

Method	Iter	Tres [sec]	Tno [sec]
MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,261	5.622	5.656
1st auto restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	375	0.478	0.434
Total of auto restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,636	6.1	6.09

Table 18 と , SSOR または SOR 右前処理 GMRES 法の CPU 時間を示す Table 17 を比較すると , 自動リスタート右前処理 MINRES 法が高速であり , 自動リスタート右前処理 MINRES 法を 1 度リスタートし , 375 ステップまでしたとき , SSOR 右前処理 GMRES 法に比べ , 91.4 倍 , SOR 右前処理 GMRES 法に比べ , 155.1 倍高速であった .

なお , bcstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対し , SOR 法右前処理 GMRES 法 , SSOR 法右前処理 GMRES 法を適用した場合の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 36 , Fig. 37 に示す .

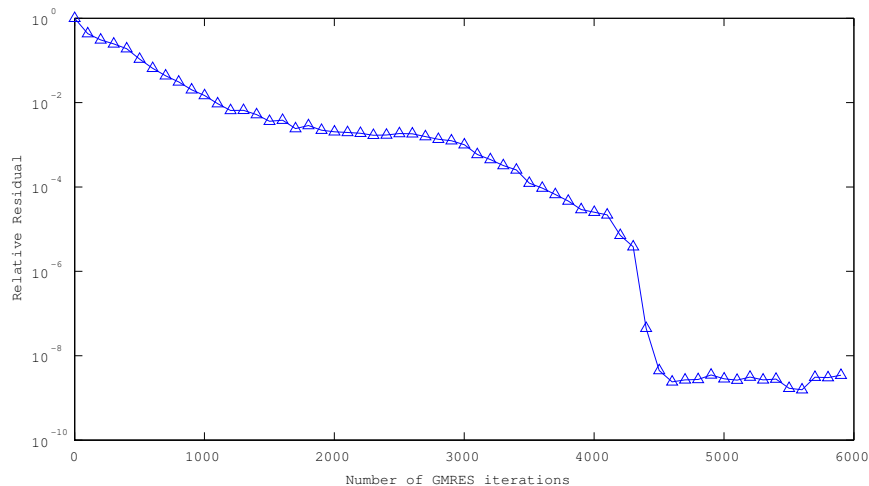


Fig. 36. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for GMRES with SOR right preconditioning for an inconsistent problem (**bcstk25**)

次に係数行列が bcstk36 である inconsistent な系に対して , GMRES 法や右前処理 GMRES 法を考える .

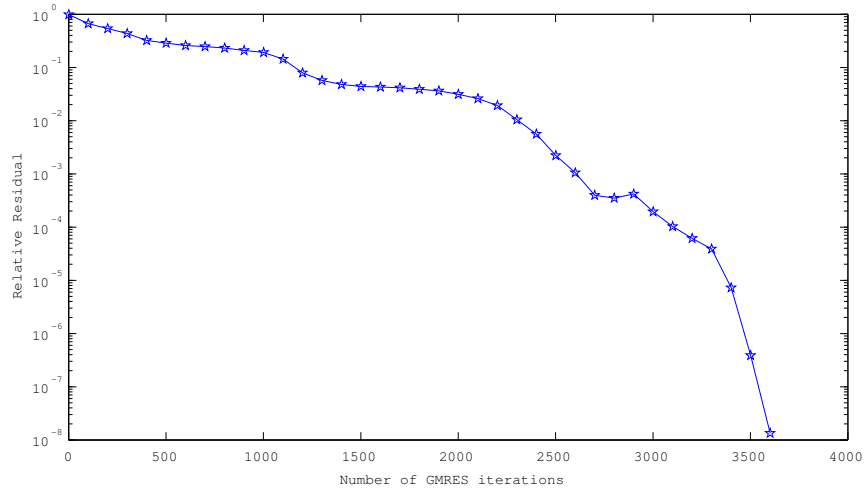


Fig. 37. $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. number of iterations for GMRES with SSOR right preconditioning for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

GMRES 法，SOR 右前処理 GMRES 法と SSOR 右前処理 GMRES 法を適用した場合の，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 38 , Fig. 39 , Fig. 40 に示す．

なお，SSOR 右前処理，SOR 右前処理では加速パラメータは 1.0 であり，内部反復数は 1 とした．

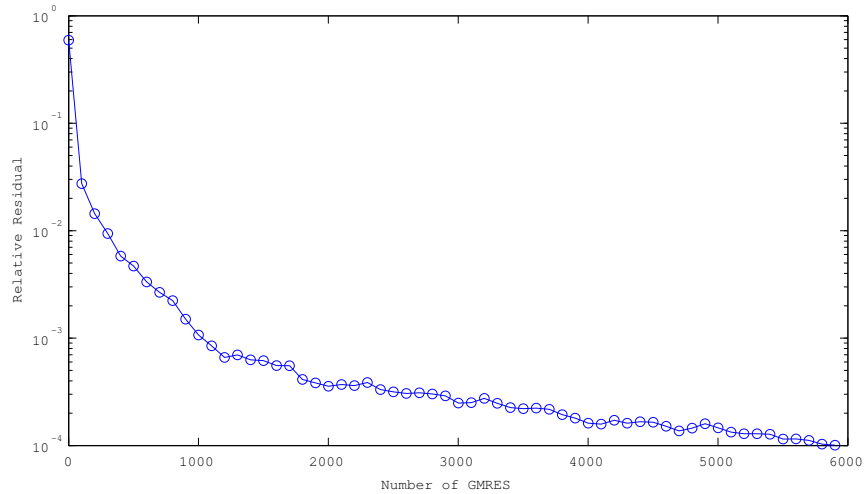


Fig. 38. $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. number of iterations for GMRES without preconditioning for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しては，前処理なし

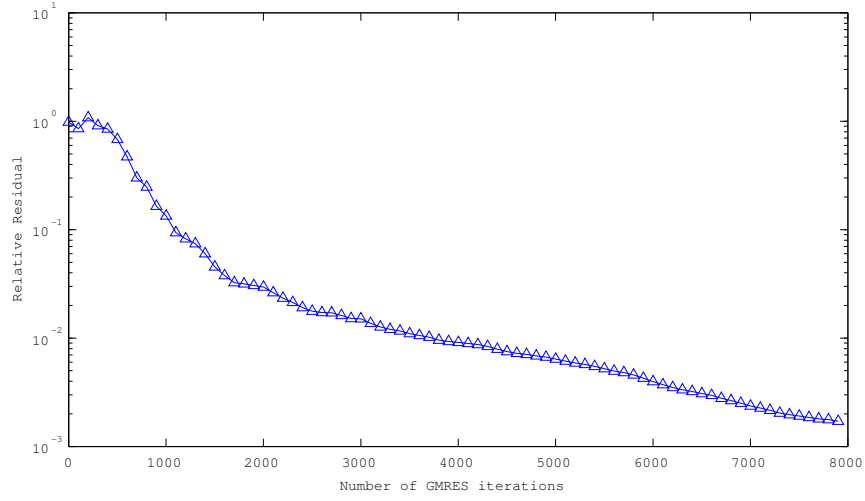


Fig. 39. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for GMRES with SOR preconditioning for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

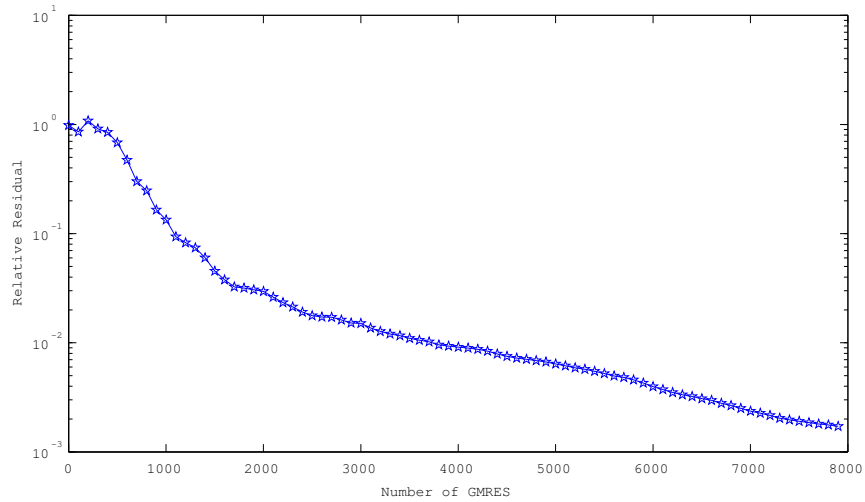


Fig. 40. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for GMRES with SSOR preconditioning for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

GMRES 法がもっとも正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を小さくでき、 10^{-4} 以下にできたが、E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 2 回リスタートした場合、 10^{-6} 以下にできたことと比較し、精度のよい解が得られたとは言えない。

今回の数値実験では GMRES 法に対して SSOR 右前処理，SOR 右前処理の内部反復数を 1 にした場合については自動リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が収束に要する CPU 時間ならびに正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を評価した場合，収束性がよいことが示された。

一方で GMRES 法は MINRES 法より計算量が大きいため，収束性の改善のために SSOR 右前処理や SOR 右前処理の内部反復数を多くすることが考えられる．今後 SOR 右前処理 GMRES 法，SSOR 右前処理 GMRES 法については内部反復数を 2 以上にすることや加速パラメータの変更を行い，あらためてリスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法と性能を比較することを考えている．

付録. 4. Eisenstat's trick の適用範囲ならびに Eisenstat IC(0) 右前処理 MINRES 法

ここまででは Eisenstat's trick を SSOR 右前処理 MINRES 法に適用した E-SSOR 右前処理 MINRES 法を提案し、数値実験によりその有効性を示してきた。

そこで本節では Eisenstat's trick が他の前処理に適用できないか検証し、できる場合にはその手法を右前処理とした MINRES 法の性能を E-SSOR 右前処理 MINRES 法の性能と比較することを目的とした数値実験を行う。

行列 L を係数行列 A の狭義下三角部分、行列 D を対角成分が正の任意の対角行列としたとき、Eisenstat's trick が適用できるのは、文献 [11], [33] で述べられているように、前処理行列 M が、

$$M = (D + L)D^{-1}(D + L^T)$$

という形の場合である。文献 [11], [33] で述べられているように、IC(0) 前処理 ([28]) がこの形になり、本研究で提案した E-SSOR 右前処理 MINRES 法での SSOR 右前処理の代わりに、IC(0) 右前処理に Eisenstat's trick を適用した MINRES 法 (以後、E-IC(0) 右前処理 MINRES 法と略記する) が実現できるのでを実装し、その数値実験結果を報告する。

IC(0) 前処理について説明する。係数行列 $A = L + D_0 + L^T$ とし、 L は A の狭義下三角部分、 D_0 は A の対角部分と分割する。

ここで IC(0) 前処理で使われる前処理行列 $M = (D + L)D^{-1}(D + L)$ は、行列 A の対角成分と行列 M の対角成分を同じにするという条件で、対角行列 D の成分を求める。具体的には対角行列 D の対角成分 $D_{(i,i)}$ を式 (付録. 4.1) のように求める。

$$(付録. 4.1) \quad D_{(i,i)} = A_{(i,i)} - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{A_{(i,k)}^2}{D_{(k,k)}}$$

なお、行列の下添え字は例えば (i, j) ならばその行列の (i, j) 成分を意味する。この式付録. 4.1 を使って求めた対角行列 D と、係数行列 A の狭義下三角成分の行列 L を使って、IC(0) 前処理行列 M は式 (付録. 4.2) で与えられる。

$$(付録. 4.2) \quad M = (D + L)D^{-1}(D + L)$$

ただし Eisenstat's trick をこの IC(0) 前処理に使うためには、対角行列 D の対角成分が正の値でなければならない。一方、行列 A の性質が悪いと対角行列 D の成分の負の成分が現れることがある ([15])。今回数値実験に用いた bcsstk25, bcsstk36 ではこの条件では正の対角行列 D が求めることができず、文献 [15] にあるように係数行列 A の対角成分に 1 以上の値である加速係数 c をかけ、対角行列 D の対角成分を正になるようにし、Eisenstat's trick を IC(0) 前処理に適用できるようにし、E-IC(0) 右前処理 MINRES 法を実現した。行列 A の対角成分を大きくした。

具体的には以下の式 (付録. 4.3) を使って，対角行列 D の対角成分を求めた．

$$(付録. 4.3) \quad D_{(i,i)} = c \times A_{(i,i)} - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{A_{(i,k)}^2}{D_{(k,k)}}$$

具体的には加速係数 c として，bcsstk25 が係数行列の場合は 1.26，bcsstk36 が係数行列の場合は 1.18 とした．加速係数 c をこれらの値にしたのは数値実験を試した中では，それぞれの係数行列の場合重み付き正規方程式の相対残差ノルムを小さくできるため，またはそれに要する反復数が小さかったためである．

Eisenstat's trick を適用した E-IC(0) 右前処理 MINRES 法のアルゴリズムが，6.1 節で説明した E-SSOR 右前処理 MINRES 法のアルゴリズムと異なる点は，以下の 2 点である．

- 対角行列 D
- E-IC(0) 右前処理 MINRES 法では E-SSOR 右前処理 MINRES 法で用いる加速パラメータ ω が 1 と固定されている点

E-IC(0) 右前処理 MINRES 法を行列 bcsstk25，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に適用した場合，それぞれ Fig. 41，Fig. 42 に重み付き正規方程式の相対残差 $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す．

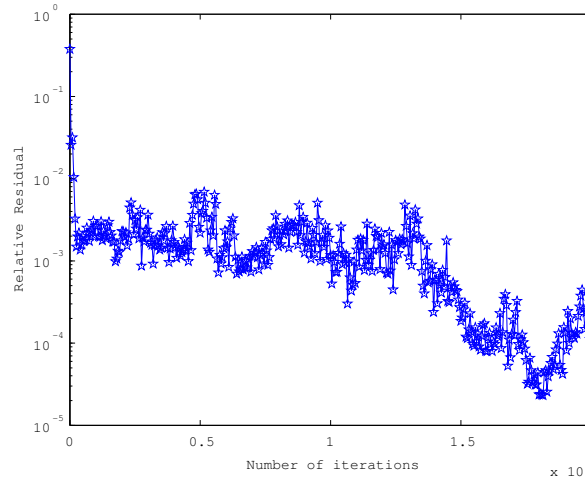


Fig. 41. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-IC(0) right preconditioning (★) for an inconsistent problem (bcsstk25)

E-IC(0) 右前処理 MINRES 法は，E-SSOR 右前処理 MINRES 法と比較し，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ を小さくすることはできなかった．

このため，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が E-IC(0) 右前処理 MINRES 法より bcsstk25，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な問題に対しては，重み付き正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ の値で評価する限り，性能がよかった．

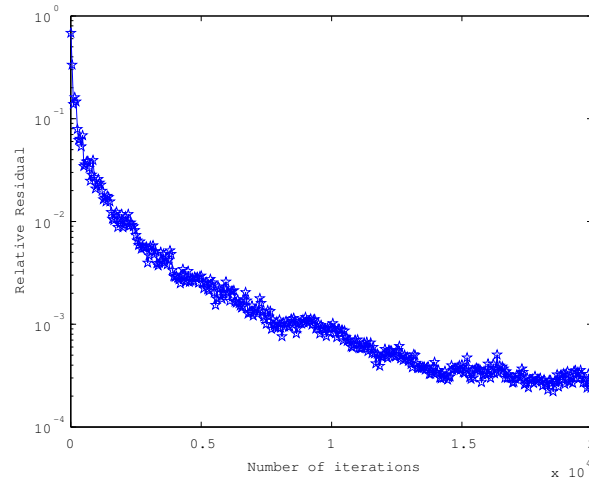


Fig. 42. $\frac{\|AM^{-1}\mathbf{r}_j\|_2}{\|AM^{-1}\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-IC(0) right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

付録. 5. 4 倍精度演算と倍精度演算の比較による，丸め誤差の影響の検証

右前処理 MINRES 法は定理 5.6 にて証明したように，正則な系，特異系いずれの場合に対しても，前処理行列の逆行列に関するノルムに関して，残差ノルムを最小とする解に収束する．

しかしながら 8 章では E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートしないと重み付き正規方程式の相対残差ノルムの値で収束を判定した場合，収束が不十分であり，リスタート計算により重み付き正規方程式の相対残差ノルムの値をより小さくすることができた．リスタート計算をしないと収束が不十分な理由を丸め誤差とした．さらに最小二乗問題を解いているので，9 章で報告したように inconsistent な系に対して E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートさせることにより，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を係数行列が bcsstk25 の場合には 10^{-10} 以下，係数行列が bcsstk36 の場合には 10^{-8} 以下にすることができた．E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタートしないと，正規方程式の相対残差ノルムの値は係数行列が bcsstk25 で inconsistent な系については 10^{-8} 以上 10^{-7} 未満，係数行列が bcsstk36 で inconsistent な系については 10^{-3} 以上 10^{-2} 未満であった．

本章では丸め誤差の影響を検証するため，E-SSOR 右前処理 MINRES 法を bcsstk25，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な系に適用した場合の数値実験を 4 倍精度演算で行った場合の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを報告し，倍精度演算の場合と比較する．なお，加速パラメータは 1.0 とした．

9.1 節で報告したように係数行列が bcsstk25 の場合にて倍精度演算による E-SSOR 右前処理 MINRES 法の 20,000 反復した場合ならびに 4,270 ステップ目の解を初期解としてリスタートした場合の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフをそれぞれ Fig. 43，Fig. 44 に示す．係数行列が bcsstk25 の場合の同じ inconsistent な系に対する E-SSOR 右前処理 MINRES 法の計算を 4 倍精度で行った際の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 45 に示す．また係数行列が bcsstk36 の場合に対する 4 倍精度演算については 9.1 節での倍精度演算同様，2 回リスタート計算を行った．リスタート計算の手法，反復数は 9.1 節同様で，最初に 20,000 反復し，そしてその 20,000 ステップ目の解を初期解として 1 回目のリスタート計算を 20,000 反復し，さらにその 1 回目のリスタート計算の 20,000 ステップ目の解を初期解として 2 回目のリスタート計算を 20,000 反復した．そこで最初の 20,000 反復の計算，1 回目のリスタート計算，2 回目のリスタート計算のときの $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを倍精度演算の場合についてはそれぞれ Fig. 46，Fig. 48，Fig. 50 に示す．4 倍精度演算の場合については，最初の 20,000 反復の計算，1 回目のリスタート計算，2 回目のリスタート計算のときの $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 47，Fig. 49，Fig. 51 に示す．

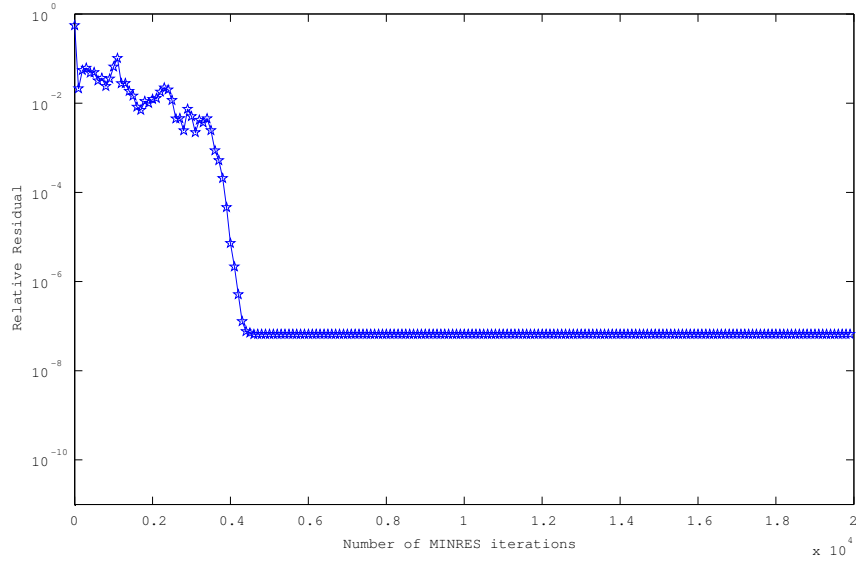


Fig. 43. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**) (double precision)

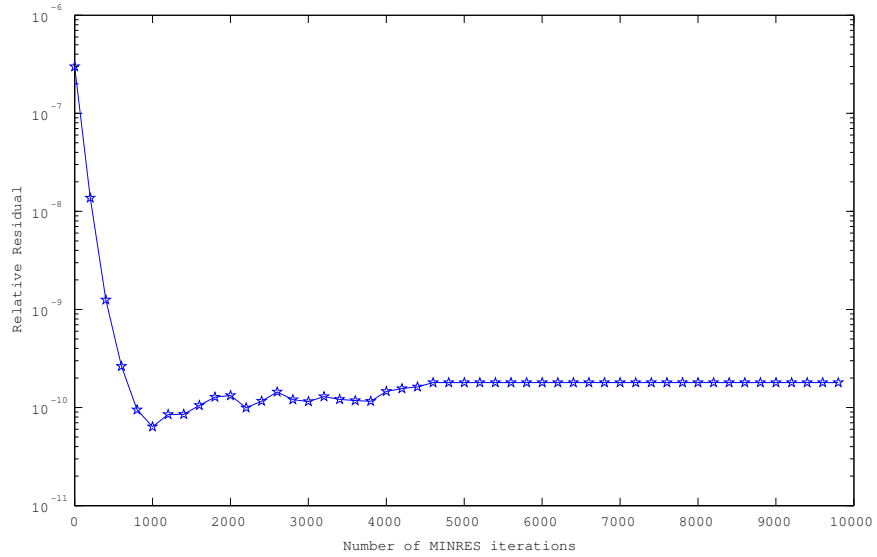


Fig. 44. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**) (double precision)

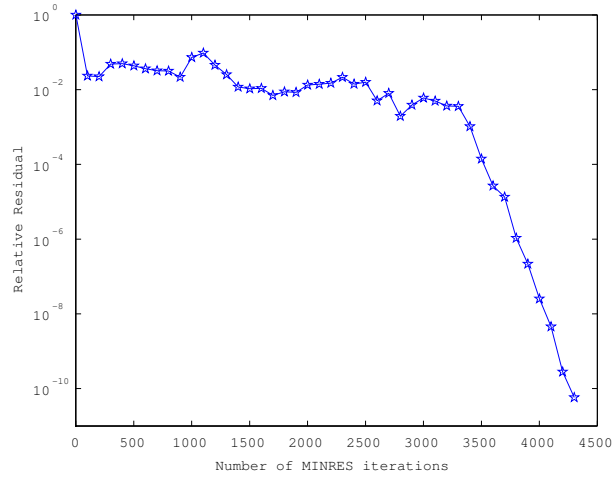


Fig. 45. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk25**) (quadruple precision)

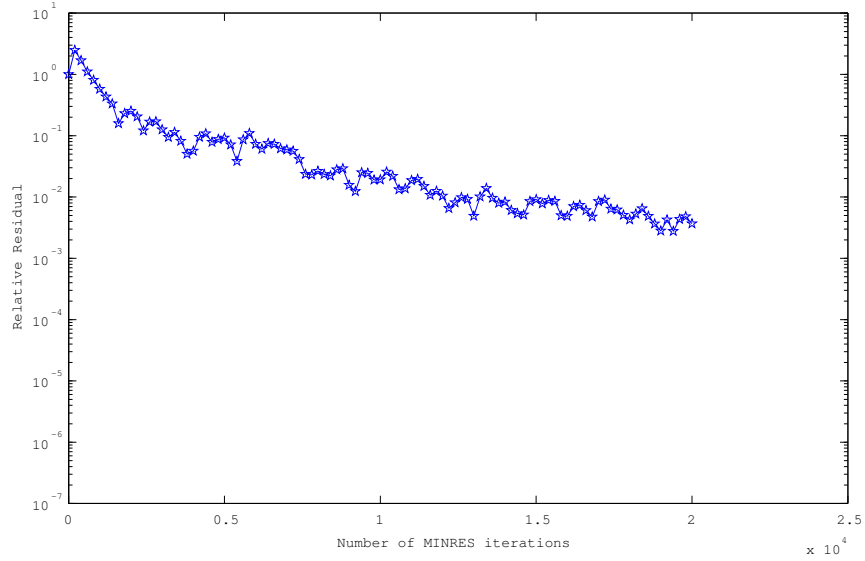


Fig. 46. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**) (double precision)

4 倍精度演算をした Fig. 45 と，倍精度演算である Fig. 43 ならびに 1 回リスタート計算をした Fig. 44 を比較すると係数行列が **bcsstk25** である inconsistent な系については，4 倍精度演算の場合リスタート計算をしなくても収束が十分であるのに対し，倍精度演算の場合リスタート計算をしないと収束が不十分であり，その理由として丸め誤差が考えられる．

そこで係数行列が **bcsstk25** である inconsistent な系に対して，収束判定条件を $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} <$

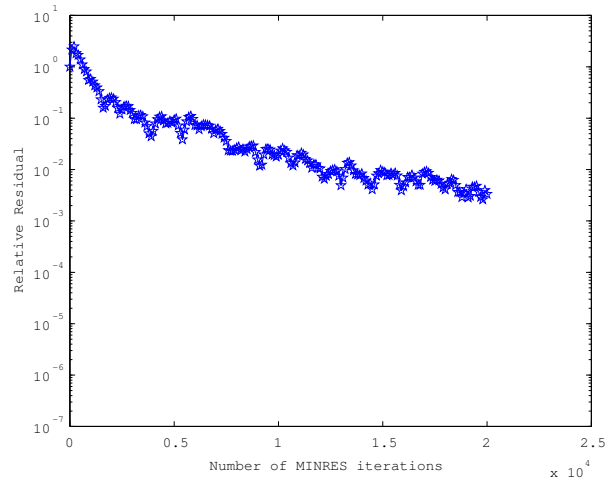


Fig. 47. $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**) (quadruple precision)

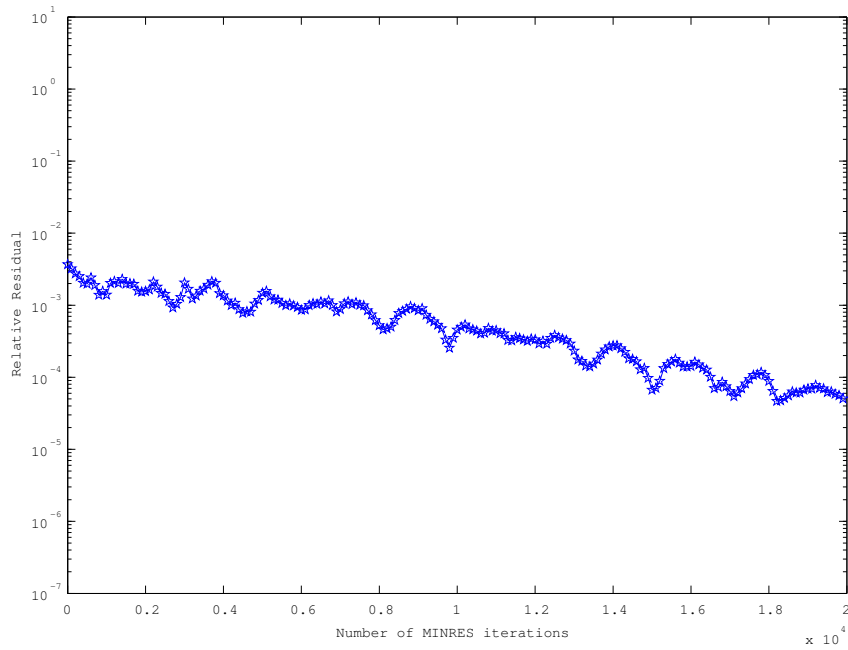


Fig. 48. $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. number of iterations after first restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**) (double precision)

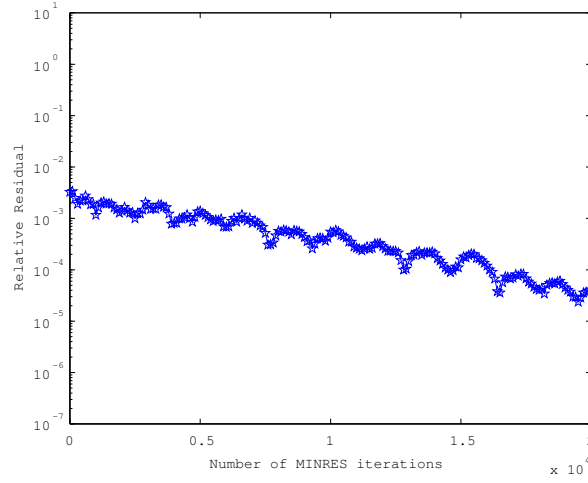


Fig. 49. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after first restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**) (quadruple precision)

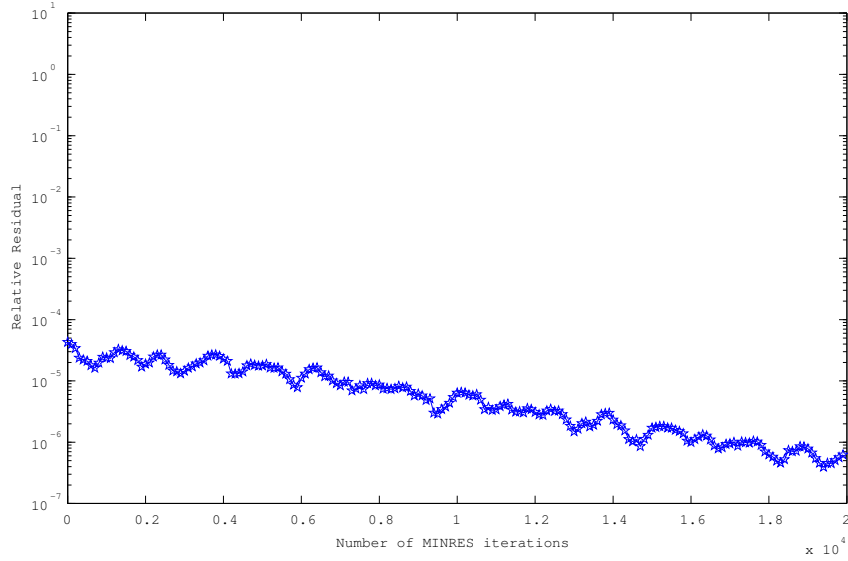


Fig. 50. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after second restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**) (double precision)

10^{-10} と設定した際の E-SSOR 右前処理 MINRES 法を倍精度演算したときと 4 倍精度演算したときの CPU 時間を比較する．なお，この比較についての CPU 時間の計測のみ，CPU: Intel(R) Core(TM) i7-3667U(2.00GHz); OS: Cent OS 6.4 の計算機において，コンパイラは Intel Fortran 13.0.1 を使用した．

Table 19 には，収束判定条件を $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-10}$ とした場合，倍精度演算ではリスタート計算が 1 回必要であり，初期ベクトルを 0 として 4,270 ステップ反復し，そこで得られた

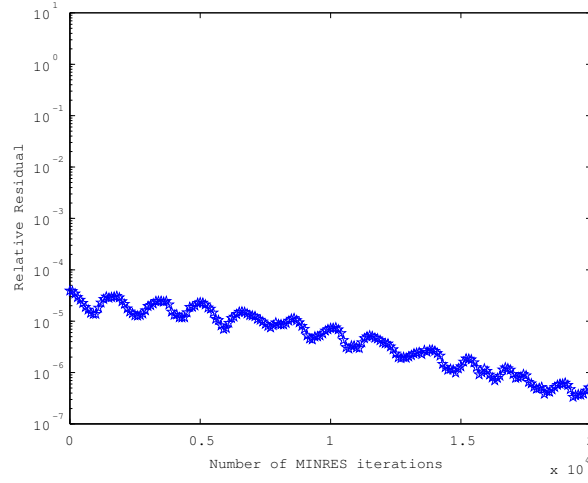


Fig. 51. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations after second restart for MINRES with E-SSOR right preconditioning (★) for an inconsistent problem (**bcsstk36**) (quadruple precision)

解を初期解として 688 ステップ反復したときの CPU 時間を記述する .

Table 19. Computation results for an inconsistent problem for **bcsstk25** (double precision) (Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm, Iter: number of iterations) Iteration number for getting the initial guess for Restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning
Convergence criterion : $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-10}$ (**bcsstk25**)

Method	Iter	Tno [sec]
MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,270	4.109
1st restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	688	0.660
Total of restarted MINRES with E-SSOR right preconditioning	4,958	4.769

Table 20 には Table 19 に示したリスタート計算を 1 回行った場合の倍精度演算による E-SSOR 右前処理 MINRES 法の総 CPU 時間と、リスタート計算をしない場合の 4 倍精度演算による E-SSOR 右前処理法の CPU 時間を示す .

Table 20 から、倍精度演算の場合リスタート計算が 1 回必要になるが、そのリスタート計算を含めた倍精度演算の方がリスタート計算を必要としない 4 倍精度演算と比較し、45.37 倍高速であった . このことから、係数行列が **bcsstk25** である inconsistent な系に対してはリスタート計算が必要であっても倍精度演算を用いた方がよかった .

一方で、係数行列が **bcsstk36** である inconsistent な系については、4 倍精度演算で 2 回リスタート計算をした場合の Fig. 51 と倍精度演算で 2 回リスタート計算をした場合の Fig. 50 を比較した場合、正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 4 倍精度演算、倍精度演

Table 20. Comparison of Right Preconditioned MINRES using E-SSOR with double precision and quadruple precision for an inconsistent problem for **bcsstk25** (Tno: computation time not including the computation of the relative residual norm, Iter: number of iterations). The values in () are the ratio compared to double precision.

Convergence criterion : $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2} < 10^{-10}$ (**bcsstk25**)

Computation precision	Iter	Tno [sec]
double precision	4,958 (1)	4.769 (1)
quadruple precision	4,129 (0.833)	216.36 (45.37)

算でも 10^{-6} 以下にすることができたが、その履歴に大きな差は見られない。これは行列 bcsstk36 の条件が悪すぎるため、4 倍精度は演算精度として不十分と考えられる。

付録. 6. Inconsistent な系ならびに悪条件な系に対する関連手法の数値実験・結果

3.1.5 節で述べた MR-2 法と RRMF 法ならびに 3.1.4 節で述べた MINRES-QLP 法はいずれも対称系に対して、残差の 2 乗ノルムを最小化し、かつ解自体の 2 乗ノルムが最小とする解を与える。いずれの手法も数値誤差を考慮しない場合、解自体の 2 乗ノルムが最小とする解を与えることから、特に係数行列が悪条件な系に対して MINRES 法より収束性がよいことを利点としている。

そこで以下では、次の 2 つを目的として、MR-2 法、RRMR 法ならびに MINRES-QLP 法を係数行列が半正定値である inconsistent な系に対する数値実験を行う。

- 悪条件な系に対して、MR-2 法、RRMR 法ならびに MINRES-QLP 法の数値誤差を考慮しない場合の理論上の利点を、丸め誤差といった数値誤差が入る場合に成立するか検証。
- 静磁場問題に対し、MR-2 法を適用し、実用性を検証。

6-1. 悪条件かつ inconsistent な系に対する MR-2 法と RRMF 法

悪条件な行列 bcsstk25, bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に RRMF 法を適用した場合、それぞれ Fig. 52, Fig. 53 に正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す。

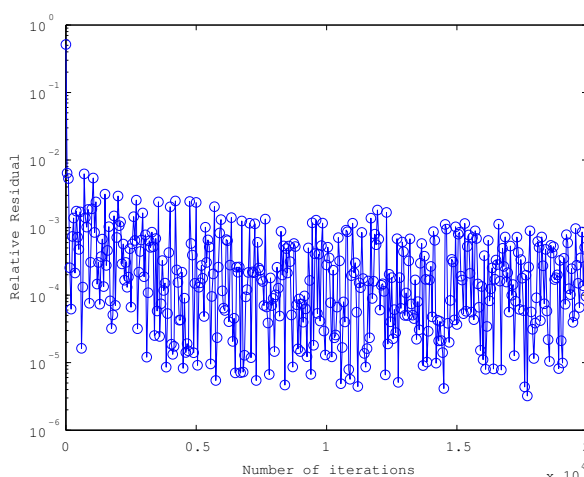


Fig. 52. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for RRMF for an inconsistent problem (bcsstk25)

RRMF 法は対称特異系に対し、最小ノルム解を与えるが、悪条件である半正定値行列

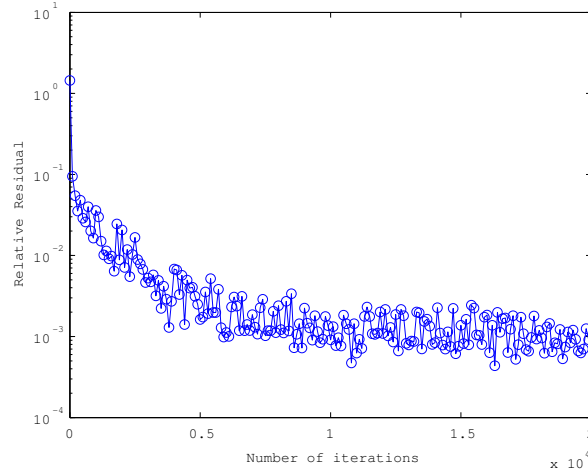


Fig. 53. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for RRMR for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

bcsstk25, bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しては，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を各々 10^{-5} , 10^{-3} 未満と収束が不十分であった．

bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な系の場合，RRMR 法を適用したときの Fig. 52 と E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用したときの Fig. 30 を比較すると，リスタートをしない際には E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-6} 未満とより小さくすることができ，有効である．

一方，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な系の場合，RRMR 法を適用したときの Fig. 53 と E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用したときの Fig. 32 を比較すると，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-3} 未満にするには RRMR 法の方が少ない反復数で済む．しかしながら両手法とも十分な収束とはいえない．

そこで，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の収束性の改善に有効であったリスタート計算を，RRMR 法も行い，E-SSOR 右前処理をリスタート計算した場合と正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を比較することで，得られる解の精度を比較する．

RRMR 法を半正定値行列 bcsstk25, bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対してリスタート計算するときの反復数ならびにその反復数での正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を Table 21 に示す．

次に，bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対して，RRMR 法を 1,112 反復し，1,112 反復目で得られた解を初期解としてリスタート計算した場合，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 54 に示す．また bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対して，RRMR 法を 3,929 反復し，3,929 反復目で得られた解を初期解としてリスタート計算した場合，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 55 に示す．

係数行列が bcsstk25 である inconsistent な連立一次方程式に対しては RRMR 法をリス

Table 21. Iteration number for getting the initial guess for Restarted RRM and $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ at that iteration number

Matrix	Iteration number	$\frac{\ A\mathbf{r}_j\ _2}{\ A\mathbf{b}\ _2}$
bcsstk25	1,112	9.83×10^{-6}
bcsstk36	3,929	9.52×10^{-4}

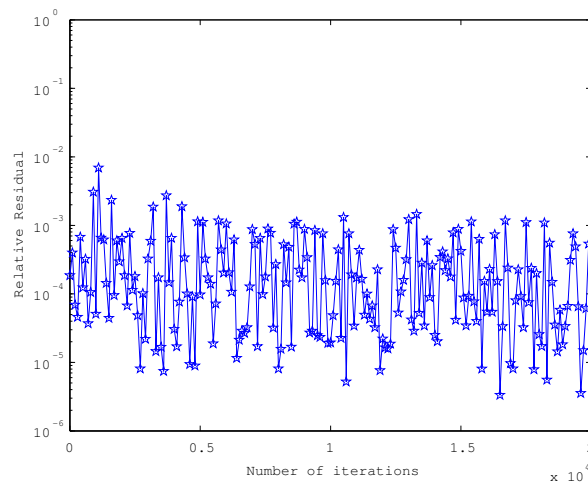


Fig. 54. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for Restarted RRM for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

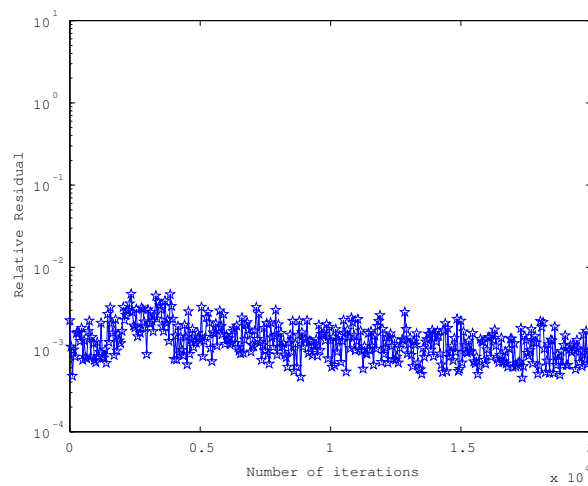


Fig. 55. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for Restarted RRM for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

タート計算した場合の Fig. 54 と、E-SSOR 右前処理 MINRES 法を自動リスタート計算した場合の Fig. 31 を比較すると、E-SSOR 右前処理 MINRES 法を自動リスタート計算した場合には、正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-8} 未満にでき、精度のより良い解が得られることができた。

一方、係数行列が bcsstk36 である inconsistent な連立一次方程式に対しては RRMR 法を 1 回リスタート計算した場合の Fig. 55 とリスタート計算をする前の Fig. 53 を比較すると、リスタート計算をしても正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値が 10^{-3} 付近で振動しており、 10^{-4} 未満にすることはできず、振動しているため E-SSOR 右前処理 MINRES 法と異なり、2 回目のリスタート計算をする初期解を得るための 1 回目のリスタート計算の反復数を決めることが困難であった。

係数行列が bcsstk36 である inconsistent な連立一次方程式に対して、RRMR 法を 1 回リスタート計算した場合の Fig. 55 と E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 2 回自動リスタート計算した場合の Fig. 34 を比較すると、E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 2 回自動リスタート計算した場合には、正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-6} 未満にでき、精度のよりよい良い解が得られることができた。

悪条件行列 bcsstk25, bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な系に対して、RRMR 法と E-SSOR 右前処理 MINRES 法の数値実験結果として以下が言えた。

- リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方がリスタート計算を含めた RRMR 法と比較し、精度の良い解が得られた。
- RRMR 法についてはリスタート計算は有効でなかった。

次に数学的には RRMR 法と等価な MR-2 法を悪条件行列 bcsstk25, bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に適用した場合、それぞれ Fig. 56, Fig. 57 に正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す。

MR-2 法も対称特異系に対し、RRMR 法同様に最小ノルム解を与えるが、Fig.56 から悪条件である半正定値行列 bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しては、正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を 10^{-5} 未満にはできたが、 10^{-6} 未満にはできず、収束が不十分であった。また正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値が大きく振動した。

この MR-2 法の結果である Fig.56 と、E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用したときの Fig. 30 を比較すると、E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が、正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を 10^{-6} 未満にすることができたのと同時に、MR-2 法のような大きな振動はない点で有効である。

一方、悪条件である半正定値行列 bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しては、Fig.57 から MR-2 法は、正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を 10^{-6} 未満にできる一方、E-SSOR 右前処理 MINRES 法を適用したときの Fig. 32 では 10^{-3} 未

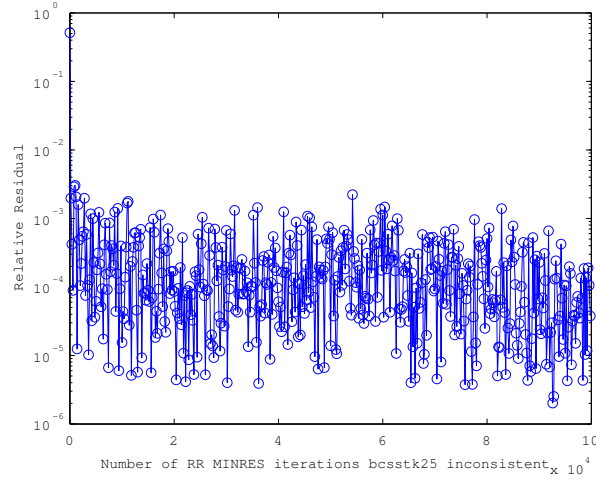


Fig. 56. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MR-2 for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

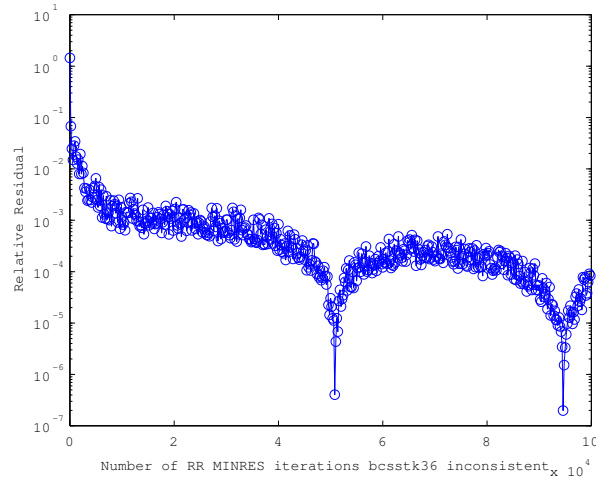


Fig. 57. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MR-2 for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

満にはできたが， 10^{-4} 未満にできなかった．MR-2 法では正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値が大きく振動するものの 10^{-6} 未満にできた以降のステップ数でも 10^{-3} 未満にできた．したがって，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しては，リスタート計算をしない場合，MR-2 法の方が E-SSOR 右前処理 MINRES 法より精度のよい解を得ることができた．

次に MR-2 法，E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタート計算した場合を比較する．まず bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対して MR-2 法を 1,430 ステップし，そのときの解を初期解としてリスタート計算した場合の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 58 に示す．なお，MR-2 法を初期ベクトルを $\mathbf{0}$

として 1,430 ステップときの正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値は, 8.27×10^{-6} であり, 10^{-5} 未満になったので, MR-2 法をリスタート計算するステップ数として 1,430 ステップに今回の研究では決めた.

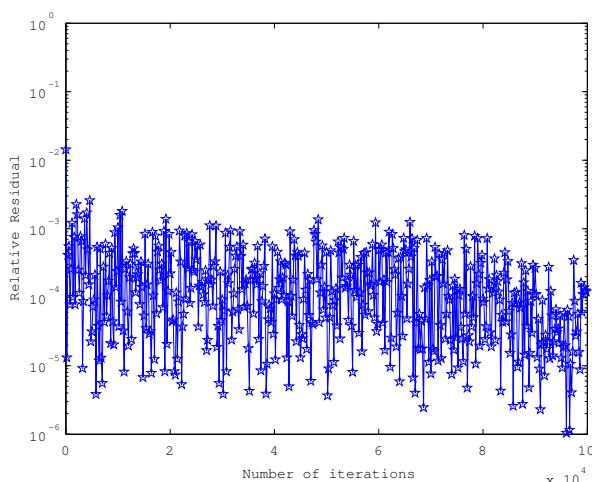


Fig. 58. $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. number of iterations for Restarted MR-2 for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

Fig. 58 から悪条件な半正定値行列 bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対して MR-2 法を 1,430 ステップし, そのときの解を初期解としてリスタート計算を 88,501 ステップした場合, 正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ が 9.99×10^{-7} になり, 10^{-6} 未満にはできたが, リスタート計算を 100,000 ステップする限りでは 10^{-7} 未満にはできなかった. さらに正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値の振動が大きかった.

これに対し, Fig. 31 から E-SSOR 右前処理 MINRES 法を自動リスタート計算すると, 正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ を 10^{-8} 未満にでき, かつ大きな振動がなかった. よって悪条件な半正定値行列 bcsstk25 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対してはリスタート MR-2 法よりリスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が頑強で精度のよい解を得ることができた.

一方, 悪条件な半正定値行列 bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しては, MR-2 法の場合の Fig. 57 と, E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 4 回リスタートした場合の Fig. 29 を比較すると, 正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値が MR-2 法は 10^{-6} 未満, リスタート E-SSOR 右前処理 MINRES 法は 10^{-8} 未満にできた.

またリスタートを用いた E-SSOR 右前処理 MINRES 法の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ が振動しながらも, 大きな振動はしない一方, MR-2 法の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ は振動が大きい. この点から悪条件な半正定値行列 bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しても MR-2 法よりリスタートを用いた E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値で評価した場合, 精度

のよい解が得られると判断した。

そこでさらに悪条件な半正定値行列 bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しても MR-2 法を 50,140 ステップ反復し，50,140 ステップで得られた解を初期解として 1 回リスタート計算した場合の正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを Fig. 59 に示す。

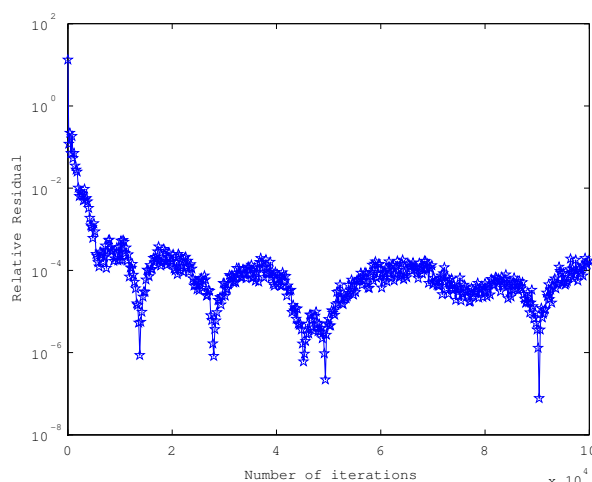


Fig. 59. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for Restarted MR-2 for an inconsistent problem (**bcsstk36**)

Fig. 59 はグラフの表示を 1 ステップ目から 200 ステップ毎にしている。bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に対しても MR-2 法を 50,140 ステップ反復し，50,140 ステップで得られた解を初期解としてリスタート計算した場合，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ をリスタート計算後の反復数で 50,809 ステップにて 6.70×10^{-8} ，94,588 ステップにて 4.39×10^{-9} とし，リスタート計算が効果があった。さらに E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 4 回リスタート計算した場合も正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ を 10^{-8} 未満にでき，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ で評価した場合倍精度であることを考慮すると両手法とも精度のよい解を得ることができた。

一方で Fig. 59 を見る限り，MR-2 法をリスタート計算した場合はリスタートしない場合同様，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ は大きく振動し， 10^{-7} 未満の後ならびに 10^{-8} 未満になった後反復を重ねると 10^{-4} 前後の値になった。それに対し E-SSOR 右前処理 MINRES 法をリスタート計算した場合，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の振動は小さい。この点では，E-SSOR 右前処理 MINRES 法を 4 回リスタートした場合の方が MR-2 法をリスタートした場合より頑強であり，優れている。

さらに MR-2 法を 2 回目以降のリスタートするにも正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の振動が大きいため，リスタートするステップ数を決めるのが容易ではない。

加えて，毎ステップ正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を計算し，収束判定するこ

とは毎ステップ正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値の計算量を考慮すると実用的でない．実際にはあるステップ毎に収束判定のために正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値を計算するのが実用的であり，その点を考慮すると正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値が振動せず， 10^{-8} 未満の精度の解を得るには4回リスタートした右前処理 E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方がリスタート MR-2 法より実用的であると考えた．

6-2. 静磁場問題における inconsistent な系に対する MR-2 法の数値実験 (実用性検証)

2.3 節，7.3 節で述べた静磁場問題における inconsistent な連立一次方程式に MR-2 法を適用した場合，Fig. 60 に正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す．

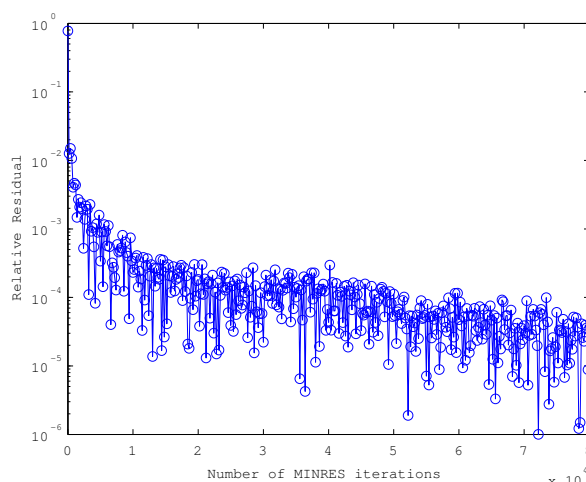


Fig. 60. $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ vs. number of iterations for MR-2 for an inconsistent problem (Static magnetic field)

MR-2 法は対称特異系に対し，最小ノルム解を与えるが，静磁場問題における係数行列が半正定値である inconsistent な連立一次方程式に対しては，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値で評価した場合， 10^{-7} 以下にできるため，精度のよりよい解が得られた．また MR-2 法は正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|Ar_j\|_2}{\|Ab\|_2}$ の値が大きく振動するのに対し，E-SSOR 右前処理 MINRES 法では振動が小さく，その点でも E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が MR-2 法よりここで扱った静磁場問題から得られる係数行列が半正定値である inconsistent な連立一次方程式に対しては優れている．

6-3. 悪条件かつ inconsistent な系に対する MINRES-QLP 法

3.1.4 節で報告した MINRES-QLP 法を悪条件な半正定値行列 bcsstk25，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な系に適用した数値実験を報告する．

この数値実験の目的は，6-1. 節同様に，悪条件な系に対して，MINRES-QLP 法の数値誤差を考慮しない場合の理論上の利点を，丸め誤差といった数値誤差が入る場合に成立するか検証することである．特に文献 [5–7] にて提案している MINRES-QLP 法は解自体の 2 乗ノルムが最小とする解を与えることから，特に係数行列が悪条件な系に対して MINRES 法より収束性がよいことを利点と主張しているので，その点を数値実験により検証する．

MINRES-QLP 法は前処理なしなので，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の結果を述べる．

係数行列が bcsstk25，bcsstk36 である inconsistent な連立一次方程式に MINRES-QLP 法を適用した場合，それぞれ Fig. 61，Fig. 62 に正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. 反復数のグラフを示す．なお，MINRES-QLP のソースプログラム (Fortran) を公開されているサイトからダウンロードし，それを今回の数値実験では用いた．

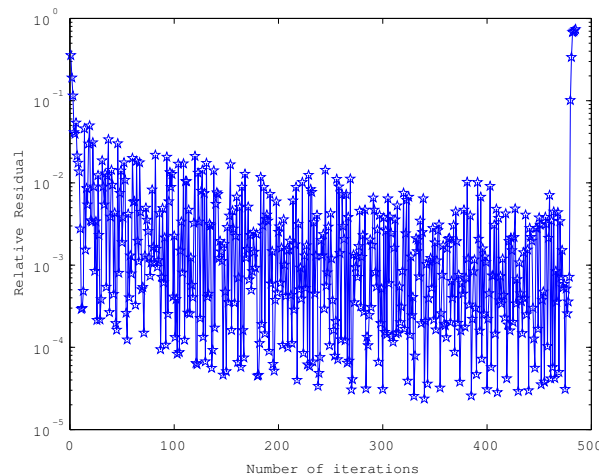


Fig. 61. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES-QLP for an inconsistent problem (**bcsstk25**)

MINRES-QLP を悪条件な bcsstk25，bcsstk36 を係数行列とする inconsistent な連立一次方程式に適用し，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値を計算したが，本論文で報告した E-SSOR 右前処理 MINRES 法による正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ と比較し，小さい値にならなかった．すなわち，正規方程式の相対残差ノルム $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ の値で評価する限り，E-SSOR 右前処理 MINRES 法の方が MINRES-QLP 法より精度のよい解を得ることができた．

一方，文献 [5–7] では MINRES-QLP の収束判定条件が本論文と異なる．今後この収束判定条件の評価方法を調査，検証し，あらためて E-SSOR 右前処理 MINRES 法との性能比較を行う予定である．

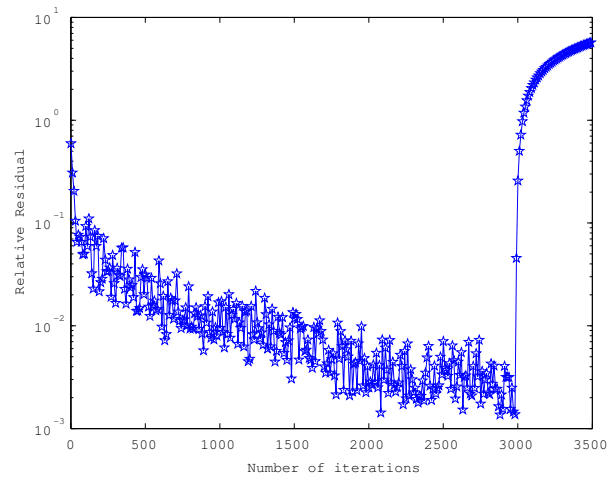


Fig. 62. $\frac{\|A\mathbf{r}_j\|_2}{\|A\mathbf{b}\|_2}$ vs. number of iterations for MINRES-QLP for an inconsistent problem (**bcsstk36**)