様　式　C－１９、F－１９－１、Z－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ３０ 年　 ６ 月 １９ 日現在

機関番号：３２６７８
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2015～2017
課題番号：１５K１７４９８

研究課題名（和文）線形方程式系に対する新型反復ソルバーの数理的解析と新展開

研究課題名（英文）Analysis and new developments on the novel iterative solvers for linear systems

研究代表者
相原　研輔（Aihara, Kensuke）

東京都市大学・知識工学部・講師

研究者番号：７０７３５４９８

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,800,000円

研究成果の概要（和文）：クリロフ部分空間法は大規模な連立一次方程式を数値的に解くための反復ソルバーとして，広く利用されている．本研究では，特に短い漸化式を用いるクリロフ部分空間法の丸め誤差解析を行い，それに基づいて従来よりも優れた収束性を持つアルゴリズムを開発した．また，近年の新しい枠組みである帰納的次元縮小法の性能向上に向けた研究に取り組んだ．さらに，悪条件な最小二乗問題やリーマン多様体上の最適化問題を効率よく解くための数値計算手法を開発した．

研究成果の概要（英文）：Krylov subspace methods are extensively used as iterative solvers for large linear system of equations. In this study, we have given a rounding error analysis to the short recurrence Krylov subspace methods, and have proposed more effective algorithms than do the conventional ones. We have also worked on improving the convergence of the recent novel iterative solvers which are referred to as the induced dimension reduction (IDR)-type methods. Moreover, we have proposed efficient numerical solvers for the ill-conditioned least squares problems and for the optimization problems on Riemannian manifolds.

研究分野：計算科学，数値解析，数値線形代数

キーワード：大規模連立一次方程式　悪条件最小二乗問題　クリロフ部分空間法　帰納的次元縮小法　丸め誤差解析　連続最適化　シュティーフェル多様体　ニュートン方程式

１．研究開始当初の背景

大規模な非対称疎行列を係数に持つ連立一次方程式を高速かつ高精度に解く数値計算アルゴリズムの開発は，科学技術計算における重要な研究テーマの一つである．

クリロフ部分空間法（線形部分空間を広げながら解を探索する方法）は，有効な反復ソルバー群であり，主に(a)双共役勾配(Bi-CG)法を代表とする双ランチョス系統の解法と（b）一般化最小残差法（GMRES）法を代表とするアーノルディ系統の解法とに大別される．(a)は，収束の振る舞いはやや不規則であるが，近似解や残差を短い漸化式で更新することで，一反復あたりの計算量や使用メモリを抑えることができる．(b)は，長い漸化式を用いており，反復毎に計算量や使用メモリが増加するが，残差を逐次的に最小化することで滑らかな収束性が得られ，数値的にも頑健である．これら二系統の解法は，1980 年代から盛んに研究され，今日の科学技術計算を支えている．しかし，近年の計算機性能の向上に伴い，対象とする問題はますます大規模かつ難解になっていることから，反復ソルバーの更なる進化が要求されている．

一方，2007 年以降，従来のクリロフ部分空間法とは異なる原理から導かれる反復ソルバーとして，IDR(s)法を代表とする帰納的次元縮小(IDR)定理に基づく方法が注目されている．これらは，双ランチョス系統の解法の拡張と見なすことができるが，部分空間の基底を生成する際に，局所的にアーノルディ系統の解法と同様の算法を用いるため，両系統を組み合わせた新しいアルゴリズムであると考えられる．ただし，計算機上に実装した際に生じる丸め誤差の影響については，解明できていない点も多く，実用的な反復ソルバーとして広く普及するには至っていない現状がある．

２．研究の目的

本研究では，従来のクリロフ部分空間法や IDR 定理に基づく反復ソルバーについて，数理的アプローチから収束性の改良を行うとともに，先行研究との関連性を体系的に整理することで，新旧のアルゴリズムの長所を活かしたソルバー開発の新たな進展を目指すことが目的である．また，標準的な連立一次方程式のみならず，悪条件な最小二乗問題など，クリロフ部分空間法が有効となり得る応用問題の効率的な求解も目指す．主な内容を以下にまとめる．

(1) 丸め誤差の収束性への影響の解析

(2) 既存のアルゴリズムの改良

(3) 新しい反復ソルバーの開発

(4) 悪条件な最小二乗問題の求解

ただし，以上の項目は，必ずしも段階的あるいは個別に達成することを目的とするわけではなく，それぞれの研究を並行して行うことで，線形計算分野におけるアルゴリズム研究の新しい展開を見出すことが本研究における第一の目標である．

３．研究の方法

IDR 定理に基づく反復ソルバーの丸め誤差解析については，従来のクリロフ部分空間法に対する解析手法が有用であるため，それを拡張・発展させる形式で研究を進める．また，その結果を従来のアルゴリズムにもフィードバックすることで，既存解法の改良にも繋げる．新しいアルゴリズムの開発については，双ランチョス系統の解法を IDR 系統の枠組みで再解釈した結果がいくつか報告されており，そこで用いられたアイデアを取り入れることで研究を進める．また，悪条件問題への応用については，当該分野の研究者の協力を得ながら行う．各項目におけるより具体的な研究方法を以下にまとめる．

(1) 丸め誤差の収束性への影響の解析

丸め誤差解析の研究は，主に内積演算から発生する丸め誤差が収束速度に与える影響と，行列とベクトルの積から発生する丸め誤差に起因する近似解精度の劣化について行われてきた．そこで，これら二つの側面から丸め誤差の収束性への影響を解析する．ただし，IDR 系統の解法については，近似解精度の劣化が特に問題視されているため，後者の点について詳しく調査する．

IDR 系統の解法において，近似解や補助ベクトルを更新する漸化式（IDR アプローチの漸化式と呼ぶ）は，従来の反復法とは異なる形式であるが，IDR アプローチの漸化式を用いて双ランチョス系統の解法を再導出する研究が行われている．そこで，IDR アプローチの漸化式を用いた解法の誤差解析を行う．なお，従来の双ランチョス系統の解法の中でも，双共役残差(Bi-CR)法など IDR アプローチの漸化式と同様の形式を用いるアルゴリズムがあるため，まずは Bi-CR 系統の解法を主体として解析を進める．

また，丸め誤差の影響を解析する方法は，数学的な理論を展開するだけではなく，実験的な検証も有用である．具体的には，多倍長演算と倍精度演算による収束性の違いを調べることで，丸め誤差の影響を視覚的に捉えることができ，数値的な収束性の解明に役立てることができる．

(2) 既存のアルゴリズムの改良

数学的に等価な解法であっても，実装方法が異なると丸め誤差の影響が異なり，収束速度や得られる近似解の精度が大きく変化する場合がある．そこで，(1)で得られた丸め誤差解析の結果に基づき，Bi-CR 系統の解法などについて，丸め誤差の影響を受けにくい形式にアルゴリズムを改良する．

(3) 新しい反復ソルバーの開発

双ランチョス系統の解法は，二つの双対なクリロフ部分空間を構築し，それらの基底が双直交系を成すことで有限回の反復で収束する．一方，IDR 系統の解法は，二つのうち片側をブロック・クリロフ部分空間に置き換えたものと解釈でき，従来よりも理論的に少ない反復回数で収束する．そこで，(2)で行った改良と片側をブロック化する考え方を組み合わせることで，従来よりも高速かつ高精度な新しいアルゴリズムを開発する．

また，ブロック・クリロフ部分空間の基底を計算する際には，アーノルディ系統の解法が利用できる．各系統の解法の選択には任意性があるため，適切な組み合わせによって，アーノルディ系統の安定性と双ランチョス系統の効率性といったそれぞれの長所を活かした新たなソルバーの開発を目指す．

(4) 悪条件な最小二乗問題の求解

研究協力者より，より実践的な問題を扱うための支援を受けるとともに，申請者による数値計算的な視点からの分析・拡充を進める．特に，最小二乗問題向けのクリロフ部分空間法である LSQR 法の改良や，(1)～(3)で得られた結果を応用することにより，従来よりも高速かつ高精度な数値解法を構築する．また，最小二乗問題の求解に関連する行列の分解アルゴリズムについても調査を進める．

４．研究成果

まず，前述の(1)～(4)の項目に関連して，以下のような成果が得られた．

(1) 丸め誤差の収束性への影響の解析

IDR アプローチの漸化式を用いる Bi-CR 系統の解法について，アルゴリズム中に現れる行列とベクトルの積によって生じる丸め誤差の影響を解析し，ある反復ベクトルの振動が収束速度や得られる近似解の精度の劣化に繋がることを明らかにした．

また，その結果を受けて，反復ベクトルの振動を抑えるための古典的なスムージング技法についても調査・解析を進めたところ，スムージング技法の計算スキームを修正することで，丸め誤差の蓄積や伝搬を防ぐ効果があることを確認した．

(2) 既存のアルゴリズムの改良

Bi-CR 系統の解法に対して，近似解や残差を更新する漸化式を修正した新しいアルゴリズムを提案し，従来よりも優れた収束性を持つことを数値実験により示した．IDR 系統の解法については，具体的なアルゴリズムの改良には至っていないが，同様に漸化式の修正を施すことで従来よりも効果的なアルゴリズムを構築できる可能性があることがわかったため，今後も検討を続ける予定である．

(3) 新しい反復ソルバーの開発

研究開始当初は，IDR 系統の解法を介して，双ランチョス系統とアーノルディ系統の長所を組み合わせた新しいアルゴリズムの開発を試みた．しかし，研究を進める過程で，反復ベクトルの収束振る舞いを改善するスムージング技法を修正して組み込むことで，両系統と同様の長所が得られ，かつ汎用的なアルゴリズムの開発に繋がることが分かった．そこで，ソルバー開発の方向性を見直し，修正されたスムージング技法を双ランチョス系統の解法の一つである自乗共役勾配(CGS)法に適用することで，収束振る舞いの滑らかな新しいアルゴリズムを開発した．この解法は，従来よりも丸め誤差の影響を受けにくく，特に得られる近似解の精度が大幅に改善されることを数値実験により確認している．従来の古典的なスムージング技法では，近似解の精度改善といった効果は見込まれないため，歴史的にも新しい知見であると言える．そこで，今後の展望としては，双ランチョス系統とアーノルディ系統の複合型の反復ソルバーの構築も視野に入れつつ，スムージング技法による新しい反復ソルバーの開発を実施していく予定である．

(4) 悪条件な最小二乗問題の求解

第一に，悪条件問題に有効な正則化法について，行列の二重対角化を用いた効率的な計算法を提案した．従来は数値的に頑健な特異値分解や計算効率のよい上三角化が用いられてきたが，二重対角化を用いることで高速化と高精度化をバランスよく達成することができる．なお，この正則化法は直接解法を対象としており，本研究課題で主眼としている反復ソルバーとの関連性は低いが，二重対角化の計算スキームを応用することで，以下の成果に繋げることができた．

第二に，悪条件問題に有効なクリロフ部分空間法の一種である LSQR 法に対して，適切な反復停止条件を与えた．LSQR 法では，反復過程で二重対角行列を係数に持つ小規模な最小二乗問題を逐次的に解くが，このときに二重対角行列の条件数を少ない計算量で求めることで，反復中に近似解の信頼性を評価し，残差と合わせて適切な停止則を与えるものである．数値実験を通して，従来よりも高精度な近似解が得られることを示した．

次に，以上の研究過程から派生して得られた研究成果について述べる．行列の分解アルゴリズムについて調査する過程で，近年，リーマン多様体上の最適化に基づく手法が注目されていることが分かり，これとクリロフ分空間法との相互の応用についても並行して研究を進めるに至った．以下にその成果についてまとめる．

まず，行列の固有値・特異値分解に関連するシュティーフェル多様体上の最適化問題

を解くためのニュートン法を提案した．従来，ニュートン方程式が複雑な行列方程式で表されることから，実装が困難な状況であったが，これにクリロフ部分空間法を適用することで効率よく実装する手法を開発し，数値実験によりその有効性を示した．また，一般化シュティーフェル多様体上で点列を更新する際に用いるレトラクションに関して，コレスキーQR 分解に基づく効果的な計算法を導出し，その性能評価を行った．さらに，グラスマン多様体上のニュートン方程式についても，クリロフ部分空間法の利用により効率よく求解できることを確認している．

以上の成果は，研究開始当初の目的とはやや異なるが，当該分野の研究者の協力も得られ，本研究課題の今後の発展に深く関わる重要な知見となった．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計　７　件）

[1] 米山 涼介，相原 研輔，石渡 恵美子，CGS 系統の反復法に対する近似解精度の改善に向けたスムージング技術の再考，日本応用数理学会論文誌，28 (2018)，pp.18--38.（査読有り）

[2] 小澤 伸也，細田 陽介，相原 研輔，データにノイズを含む悪条件最小二乗問題に対する LSQR 法の反復停止則について，電子情報通信学会論文誌 A，研究速報，J101-A (2018)，pp.15--19.（査読有り）

[3] Kensuke Aihara and Hiroyuki Sato, A matrix-free implementation of Riemannian Newton's method on the Stiefel manifold, Optimization Letters, 11 (2017), pp.1729--1741.（査読有り）

[4] Kensuke Aihara, Variants of the groupwise update strategy for short-recurrence Krylov subspace methods, Numerical Algorithms, 75 (2017), pp.397--412.（査読有り）

[5] 佐藤 寛之，相原 研輔，一般化シュティーフェル多様体上のレトラクションとその効果的な実装について，京都大学数理解析研究所講究録，2027 (2017)，pp.125--134.（査読無し）

[6] 小澤 伸也，細田 陽介，相原 研輔，行列の二重対角化を用いた正則化法による悪条件問題の数値計算法，電子情報通信学会論文誌 A，J100-A (2017)，pp.92--101.（査読有り）

[7] 佐藤 寛之，相原 研輔，シュティーフェル多様体上のニュートン法とその収束性解析，京都大学数理解析研究所講究録，1981 (2016)，pp.127--142.（査読無し）

〔学会発表〕（計　３０　件）

[1] Kensuke Aihara and Hiroyuki Sato, Solving a Newton Equation on the Stiefel Manifold with Matrix-Free Krylov Subspace Methods, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18), Tokyo, Japan, 2018.

[2] 相原 研輔，短い漸化式を用いる Krylov 部分空間法の偽収束改善について，RIMS 共同研究（公開型）数値解析学の最前線 -理論・方法・応用-，京都大学数理解析研究所，2017 年.

[3] Kensuke Aihara, Ryosuke Komeyama and Emiko Ishiwata, Numerical study on combining the CGS-type methods and the residual smoothing technique, 2017 Meeting of the International Linear Algebra Society (ILAS2017), Iowa, USA, 2017.

[4] Kensuke Aihara, A variant of the group-wise update strategy in Krylov subspace methods with short recurrences, 20th Conference of the International Linear Algebra Society (ILAS2016), Leuven, Belgium, 2016.

[5] Kensuke Aihara, A group-wise updating strategy for the bi-conjugate residual method, Workshop on Numerical Algebra, Algorithms, and Analysis, Tokyo, Japan, 2016.

[6] Kensuke Aihara and Hiroyuki Sato, Matrix-Free Krylov Subspace Methods for Solving a Riemannian Newton Equation, SIAM Conference on Applied Linear Algebra (LA15), Atlanta, USA, 2015.

[7] Hiroyuki Sato and Kensuke Aihara, Riemannian Newton's Method for Optimization Problems on the Stiefel Manifold, 22nd International Symposium on Mathematical Programming (ISMP2015), Pittsburgh, USA, 2015.

〔その他〕
ホームページ等
http://www.comm.tcu.ac.jp/~aiharak/cv.html

６．研究組織

(1)研究代表者

相原 研輔（AIHARA, Kensuke）
東京都市大学・知識工学部・講師
研究者番号：70735498

(2)研究協力者

細田 陽介（HOSODA, Yohsuke）
福井大学・学術研究院工学系部門・教授

佐藤 寛之（SATO, Hiroyuki）
京都大学・白眉センター・助教