

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 6 月 15 日現在

機関番号：62615

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009～2011

課題番号：21560072

研究課題名（和文）クリロフ部分空間法による最小二乗問題の解法

研究課題名（英文）The Solution of Least Squares Problems Using Krylov Subspace Methods

研究代表者

速水 謙 (Ken Hayami)

国立情報学研究所・情報学プリンシプル研究系・教授

研究者番号：20251358

研究成果の概要（和文）：最小二乗問題は、例えば未知数の数よりも方程式の数の方が多いような連立一次方程式に対して、なるべくすべての方程式をよく満たすような解を求める問題で、統計学、測量、制御など、科学、工学、社会学で観測データをなるべくよく説明するモデル式を立てるときなどに生じる。本研究では、大規模で解きにくい最小二乗問題でも高速に精度よく、反復的に解くための新しい解法を開発し、その有効性を数値実験と理論の両面から検証した。

研究成果の概要（英文）：Least squares problems arise, for instance, when one wants to find a solution to system of linear equations where there are more equations than unknowns. Such problems arise in science, engineering and sociology, for instance, in statistics, survey and control, where one develops a model equation which best fits observed data. In this research, we developed a new method to solve large and difficult least squares problems efficiently and accurately using an iterative scheme. We demonstrated the effectiveness of the method by numerical experiments and theory.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2010 年度	900,000	270,000	1,170,000
2011 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎、工学基礎

キーワード：最小二乗問題、連立一次方程式、逆問題、クリロフ部分空間法、GMRES 法、前処理、内部反復、共役勾配法

1. 研究開始当初の背景

(1) 大規模で条件が悪い、またランク落ちした最小二乗問題に対して従来有効な反復解法がなかったので、そのような問題でも効率的に、精度のよい解を与える解法を開発するとともに、その数学的な性質を明らかにしたかった。

(2) 薬物動態モデルなどで生じる、未知数よりも観測量の方が少ないような逆問題に対して、効率よく、複数の解を列挙するような解法が知られて

いなかったもので、そのような解法を開発しなかった。

2. 研究の目的

- (1) 大規模で条件が悪い、またランク落ちした最小二乗問題に対して、効率的に、精度のよい解を与える反復解法を開発するとともに、その数学的な性質を明らかにする。
- (2) 薬物動態モデルなどで生じる、未知数よりも観測量の方が少ないような劣決定逆問題に対して、効率よく、複数の解を列挙するような解法を開発する。

3. 研究の方法

- (1) 最小二乗問題と等価な正規方程式の定常反復法（たとえばSOR法）を内部反復として用い、外部反復として一般化最小残差(GMRES)法を用いることにより、少ない計算量とメモリーで速く収束する反復法を開発した。
- (2) 近似解のクラスターに対して順問題を記述する関数の勾配を優決定の最小二乗問題を解くことにより求め、関数の線形近似を求める。次に、その線形近似により、観測値を実現するような近似解で、前回の解に最も近い解を劣決定の最小二乗問題を解くことにより求める。これを反復的に行い、近似解のクラスターに対するニュートン法(Cluster Newton Method)を開発した。

4. 研究成果

- (1) 大規模、悪条件、ランク落ちの優決定および劣決定最小二乗問題に対して、従来法よりはるかに速く、正確に解を求める内部反復 GMRES 法を開発した。成果は国際的に注目され、この分野の top journal に投稿し、minor revision を行っている。また、国際学会で度々招待講演を行っている(学会発表⑭など)。また、この研究の基礎となった研究(論文③)も、上記と同じ論文誌で4か月間最も download が多かった。他にも Greville 法を前処理に用いる方法(論文①)を開発した。
- (2) 劣決定逆問題に対する新解法を開発し、薬物動態モデルで生じる逆問題に適用したところ、従来法の50倍高速であった。結果は逆問題の top journal に投稿中である、国際的にも薬学、化学への応用など、関心が集まっている(学会発表⑥、⑧など)。

- (3) 他にも、最小二乗問題の反復解法の応用として、電子顕微鏡の画像再構成への応用の研究に着手し、画像値の非負制約や2階差分作用素を用いた正則化による再生画像の改良などの初期的な成果を得た。(学会発表③)

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計5件)

- ① Cui, X., Hayami, K. and Yin, J.-F., Greville's method for preconditioning least squares problems, *Advances in Computational Mathematics*, 査読有, Vol. 35, 2011, pp. 243-269. DOI: 10.1007/s10444-011-9171-x
- ② Hayami, K. and Sugihara, M., A geometric view of Krylov subspace methods on singular systems, *Numerical Linear Algebra with Applications*, 査読有, Vol. 18, 2011, pp.449-469. DOI: 10.1002/nla.737
- ③ Hayami, K., Yin, J.-F., and Ito, T., GMRES methods for least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 査読有, Vol. 31, 2010, pp. 2400-2430. DOI. 10.1137/070696313
- ④ Cui, X. and Hayami, K., Generalized approximate inverse preconditioners for least squares problems, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 査読有, Vol. 26, 2009, pp. 1-14. http://projecteuclid.org/DPubS/Repository/1.0/Disseminate?handle=euclid.jjiam/1244209203&view=body&content-type=pdf_1
- ⑤ Yin, J.-F. and Hayami, K., Preconditioned GMRES methods with incomplete Givens orthogonalization method for large sparse least-squares problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 査読有, Vol. 226, 2009, pp. 177-186. DOI:10.1016/j.cam.2008.05.052

[学会発表] (計38件)

- ① Morikuni, K. and Hayami, K., Stationary inner-iteration preconditioned GMRES method for

- least squares problems, Twelfth Copper Mountain Conference on Iterative Methods, Copper Mountain, Colorado, March 25-30, 2012
- ② Morikuni, K. and Hayami, K., Inner-iteration preconditioning for least squares problems, International Workshop on Computational Science and Numerical Analysis, The University of Electro-Communications, Tokyo, March 24-26, 2012
- ③ 保國 恵一, 細田 陽介, 速水 謙, 電子顕微鏡の画像再構成逆問題に対する ART およびクリロフ部分空間法の改良, 画像科学シンポジウム・バイオイメージングフォーラム, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター, 2012 年 3 月 5 日 - 6 日.
- ④ 保國恵一, 速水 謙, 最小二乗問題に対する内部反復前処理, 研究集会「科学技術計算における理論と応用の新展開」, 予稿集 pp. 7-9, 京都大学数理解析研究所 2011 年 10 月 25-27 日
- ⑤ Morikuni, K. and Hayami, K., Inner-iteration GMRES methods for least squares problems, International Conference on Scientific Computing (SC2011), Special session: Iterative Methods for Linear Systems, S. Margherita di Pula, Sardinia, Italy, October 10-14, 2011.
- ⑥ Aoki, Y., Hayami, K., Konagaya, A., A numerical method for an underdetermined inverse problem in pharmacokinetics, Contributed Paper, CP102 Life Sciences III, 7th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2011), Vancouver, July 18-22, 2011.
- ⑦ Morikuni, K. and Hayami, K., Inner-iteration CG and GMRES methods for least squares problems, Mini-Symposium MS312, The Iterative Solution of Least Squares Problems, 7th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2011), Vancouver, July 18-22, 2011.
- ⑧ Aoki, Y., Hayami, K., Konagaya, A., and De Sterck, H., An Algorithm for Solving Underdetermined Inverse Problems: Application to Parameter Identification for a Pharmacokinetics Model, Poster Presentation, (First Prize, AC.CES Poster Competition), Aachen Conference on Computational Engineering Science (AC.CES) Aachen, July 13-15, 2011.
- ⑨ Morikuni, K. and Hayami, K., Inner-iteration preconditioners for least squares problems, Workshop on Numerical Linear Algebra, Conference on the Foundations of Computational Mathematics (FoCM'11), Budapest University of Technology and Economics, July 4-14, 2011.
- ⑩ Morikuni, K. and Hayami, K., Preconditioned GMRES using inner iterations for underdetermined least squares problems (招待講演), International Workshop on Numerical Linear Algebra and its Applications, Tongji University, Shanghai, June 30-July 4, 2011.
- ⑪ Aoki, Y., Hayami, K., De Sterke, H., and Konagaya, A., An algorithm for solving underdetermined inverse problems: An application to a pharmacokinetics model, Applied Inverse Problems Conference, May 23-27, 2011, Texas A&M University.
- ⑫ Morikuni, K. and Hayami, K., Inner-iteration GMRES methods for underdetermined least squares problems, 10th IMACS International Symposium on Iterative Methods in Scientific Computing, Marrakech, 2011 年 5 月.
- ⑬ Morikuni, K. and Hayami, K., Inner Iteration Preconditioners for Least Squares Problems -Overdetermined, Underdetermined, and Rank-Deficient Cases-, (招待講演), Workshop on Matrix Equations and Tensor Computations, Changsha, 2011 年 4 月
- ⑭ Morikuni, K. and Hayami, K., Inner-Iteration Preconditioners for Least Squares Problems, (招待講演), The Third International Conference on Numerical Algebra and Scientific Computing (NASC10), Beijing, 2010 年 10 月.
- ⑮ 青木康憲, 速水 謙, 小長谷明彦, 最小二乗法を用いた薬物動態モデルの係数集合推定法, 日本応用数学会 2010 年度年会 講演予稿集, pp. 223-224, 明治大学, 2010 年 9 月.
- ⑯ 速水 謙, 特異な系に対するクリロフ部分空間法, (特別講演), 2010 年度数値解析研究集会, 国立信州高遠青少年自然の家, 2010 年 8 月.
- ⑰ Morikuni, K. and Hayami, K., Inner-Iteration Preconditioners for

Least Squares Problems, (招待講演),
The 6th East Asia SIAM Conference
2010 (EASIAM), Kuala Lumpur,
Malaysia, 2010年6月.

⑱ Hayami, K., Sugihara, M. and Yin,
J.-F., A geometric view of Krylov
subspace methods on singular systems,
2009 SIAM Conference on Applied
Linear Algebra, Seaside, California,
2009年10月.

⑲ Hayami, K. and Sugihara, M., A
Geometric View of Krylov Subspace
Methods on Singular Systems, (招待講
演), International Conference on
Engineering and Computational
Mathematics (ECM2009), Hong Kong,
2009年5月.

[図書] (計1件)

① 速水 謙, 大西和榮, 萩原 一郎, 田端 正
久 監訳, 計算力学理論ハンドブック,
(13章 境界要素法と有限要素法の結合),
朝倉書店, pp. 355-393, 2010.
(E. Stein, R. de Borst and T.J.R.
Hughes eds., Encyclopedia of
Computational Mechanics, Vol. 1:
Fundamentals, John Wiley & Sons,
2004 の翻訳)

[その他]

ホームページ等

<http://researchmap.jp/KenHayami/>

<http://research.nii.ac.jp/~hayami/index-j.htm>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

速水 謙 (HAYAMI KEN)

国立情報学研究所・情報学プリンシプル研究
系・教授

研究者番号 : 20251358

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし