

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 11 日現在

機関番号：13401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560518

研究課題名(和文)大規模悪条件線形方程式に対する数値解法の開発とその応用

研究課題名(英文)Development of numerical methods for solving large-scale ill-conditioned linear system of equations and its applications

研究代表者

細田 陽介(Hosoda, Yohsuke)

福井大学・工学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：80264951

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,500,000円

研究成果の概要(和文)：本研究における我々の目的は、大規模な悪条件線形方程式に対して、安定かつ高速な数値計算法の構築にある。係数行列が密行列の場合、一般に行列の特異値分解をもととした数値計算法が用いられる。しかし、特異値分解は計算量が多いという欠点を持つ。そのため我々は特異値分解よりも計算量の少ない行列のQR分解に着目し、そのQR分解を用いた数値計算法の適用を試みる。さらに、このQR分解に再帰的なブロック化コレスキー分解を用いた再帰的なブロック化グラム・シュミット法を適用することにより、従来の方法に比べて高速かつ安定に求解できることを数値実験により検証した。その結果を国際会議において発表した。

研究成果の概要(英文)：The purpose of our study is to develop new numerical methods for solving large-scale ill-conditioned linear system of equations. For dense matrices, numerical methods based on the singular value decomposition (SVD) have been used. However, these methods need high computational costs. To overcome such difficulties, we make use of numerical methods based on the QR decomposition instead of the SVD. We propose a new algorithm for efficiently computing the QR factorization of a given matrix. Our method uses a recursive blocked Gram-Schmidt orthogonalization and a recursive blocked Cholesky factorization. Numerical experiments show that our method is better than the conventional methods.

研究分野：数値解析

キーワード：悪条件線形方程式 特異値分解 QR分解 ブロック化アルゴリズム

1. 研究開始当初の背景

逆問題は、理学・工学など、様々な分野において実際に現れる現実的な問題であり、数学的に定式化すると多くの逆問題は悪条件な線形方程式として表される。それゆえ、悪条件線形方程式に対しての有効な数値解法の開発は数値解析の重要なテーマの一つであるといえる。

悪条件線形方程式は、観測データなどに混入した微小なノイズが解に多大な影響を与える極めて敏感な方程式であり、そのため数値的に安定な解法を用いないと意味のある解を求めることができない。一般的な数値計算法としては、行列の特異値分解をもとにした数値計算法があるが、特異値分解は行列の固有値問題アルゴリズムを用いて求められるため、計算量が多いという欠点を持つ。そのため、大規模な悪条件線形方程式の求解には困難が伴うこととなる。また、大規模問題において一般的な疎行列を係数行列に持つような場合は、通常の方法では誤差の拡大を防ぐことができず、一般的な数値計算法は確立されていないと言える。

2. 研究の目的

本研究の目的は、数値的に不安定なこのような悪条件線形方程式に対して、高速で安定な数値計算法を開発することにある。そして、その有効性をさまざまな問題に適用することにより検証を行い、実際の逆問題に対しても有効な数値計算スキームを整備することにより、逆問題が現れる多くの研究分野に対しての貢献を目指す。

3. 研究の方法

数値計算法の開発においては、方法の理論的な解析と、数値実験による検証が必要不可欠である。そのため、まずは既存の数値計算法を理論的に解析し、その長所と問題点を洗い出すことにより、新たな数値計算法の開発を目指した。関連する研究を行っている他機関の研究者と積極的に情報交換を行い、悪条件線形方程式の数値計算法だけでなく、一般的な線形方程式などの数値計算法や、最新の数値線形代数の手法についても検証を行った。そして、それらの知見をもとに、新たな数値計算法を設計し、代表的な問題に対して数値実験を繰り返し、有効性を検証した。その結果を再度、他機関の研究者と情報共有し、さらに解法のブラッシュアップにつとめた。理論的な解析や、典型的な数値例に対する数値実験だけではなく、実際問題に対しての適用による解法の有効性の検証も行う予定であったが、残念ながら満足いく実験を行うことができず、それに関しては今後の課題である。

4. 研究成果

悪条件線形方程式の代表的な数値計算法に行列の特異値分解がある。しかし、特異値

分解は計算量の多い数値計算法であるため、大規模な問題への適用は困難である。この問題に対して我々は、特異値分解よりも計算量の少ない QR 分解を用いた悪条件線形方程式の数値計算法に着目した。QR 分解は特異値分解よりも計算量が少ないが、それでも、一般的な線形方程式に対する数値計算法よりも計算量が多いので、この QR 分解の更なる高速化を目指すことにより、大規模な悪条件線形方程式の高速な数値計算法の構築を目指した。

行列の QR 分解のための数値計算法として、
グラム・シュミット法
ハウスホルダー変換
ギブンス変換

が挙げられる。上記のうち、もっとも計算量が少なく、よく用いられる方法がハウスホルダー変換による方法である。一方、現在の数値線形計算プログラムは、ブロック化アルゴリズムが用いられている。これは、行列を要素ごとに計算するのではなく、行列を小さなブロックに分けて、そのブロックを要素のように計算を行う手法である。このとき、ブロック同士の演算は専用のプログラムを用いることにより、高速に行うことができる。

ハウスホルダー変換による QR 分解も、このブロック化手法を用いて計算することが可能であるが、本研究ではグラム・シュミット法をブロック化する手法を採用した。さらに、このブロック化手法を再帰的に行うことにより、ブロック専用ルーチンで高速演算が可能なる部分を出来る限り大きくとれるように設計した。

また、ブロック化手法では、ブロック内部の演算も行う必要がある。具体的には、ブロック化 QR 分解では、ブロック内部の QR 分解を行う必要があるが、本来であれば、この部分の計算は、上記のブロック専用ルーチンを用いることができず、そのため、ボトルネックとなってしまうことが多い。我々はこの部分の計算にも、再帰的なブロック化コレスキー分解を適用する方法を開発した。これにより、本手法では大部分をブロック専用ルーチンで計算可能である。その結果、本手法は理論的にはグラム・シュミット法よりも計算量が少ないハウスホルダー変換による QR 分解よりも高速に行列の QR 分解が求まることを数値実験を用いて確認することができた。その研究成果が下記雑誌論文 ならびに、学会発表 である。

上記の結果は主に係数行列が密行列の場合の数値計算法であるが、多くの大規模悪条件問題では、係数行列が疎行列となる。疎行列に対する数値計算法は密行列のときとは異なり反復解法が用いられる。反復解法とは、特異値分解や QR 分解など、係数行列を方程式が解き易い形式に分解するのではなく、方程式の解に収束するようなベクトルの列を生成する数値計算法である。

反復解法は、ベクトル列の生成する方法に

より、定常反復法と非定常反復法に大別することができる。一般に、定常反復法は安定であるが収束が遅く、非定常反復法は丸目誤差などのノイズには弱い、収束する場合は速いという特性をもつ。そのため、悪条件線形方程式には ART 法や SIRT 法など、定常反復法を用いるのが一般的である。

本研究では、大規模悪条件線形方程式に正則化手法を導入し、それに対して非定常反復法の適用を試みた。また、非線形な正則化法である最大エントロピー法の導入も試み、その数値計算法にニュートン法と共役勾配法を適用し、その有効性を電子顕微鏡 CT 像再構成問題を用いて検証した。

前者では線形正則化法と非定常反復法である CGLS 法を組み合わせることにより、一般的な ART 法や SIRT 法よりも高速に像を再構成することができることが確認できた。しかし、これら線形解法では画像に負値がでてしまい(想定している画像はすべて非負である)その影響からか、当初想定していたような高品質な画像を再構成することが困難であった。反復の途中で、負値をゼロに置き換えるようリスタートを施すことにより、多少の画像の改善は確認できたが、この方法ではベクトル列の収束を理論的に保証することは困難であるという問題が残った。

後者の最大エントロピー法は画像はすべて非負であるという前提条件をクリアすることができるが、非線形な制約条件を課すため、計算量が多いという欠点をもつ。本研究では、エントロピー最大という非線形制約条件以外に、線形な制約条件を組み合わせることで、さらに高品質な画像を再構成できることを数値実験により検証した。

線形正則化法ならびに非線形正則化法いずれの場合においても、問題となるのは大規模疎行列を係数行列に持つ線形方程式に対する数値計算をいかにして高速に解くかという点である。非線形正則化法では、ニュートン法の各反復において、ヤコビアン行列を係数行列に持つ線形方程式の数値計算を行う必要があり、この部分の計算が、全体のほぼすべての時間を占めるため、高速な数値計算法の確立が重要である。一般に、反復解法は前処理手法と併用されるが、これらの問題では通常の不完全分解を用いた前処理行列の構築が困難である。内部反復などの行列の分解を用いない前処理手法の適用による計算時間の更なる短縮が今後の課題である。

これら、大規模疎行列に対しての研究成果は、学会発表 ~ で行った。発表は、大規模問題に対しての一般的な数値計算法の構築についてのトピックを紹介したものである。発表は、電波干渉計を想定した天体画像復元問題に対してのアプローチと、その数値実験結果を発表したものである。そして、発表は、電子顕微鏡 CT 像再構成問題への適用結果についての結果であり、この発表では CT 像再構成問題を想定した数値シミュレ

ーションだけではなく、実際に電子顕微鏡で撮影されたデータに対して画像再構成を行った結果も合わせて発表した。実際の撮影データは観測ノイズが多く、より鮮明で高品質な画像の再構築は今後の重要なテーマの一つである。

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1件)

Shinya Ozawa, Yohsuke Hosoda, Takemitsu Hasegawa, A new QR factorization method by recursive blocked Gram-Schmidt algorithm and recursive blocked Cholesky factorization, Proceedings of the International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics 2014 (ICNAAM 2014) AIP Conf. Proc. 1648, refereed, pp.690003-1-690003-4, doi: 10.1063/1.4912918

[学会発表](計4件)

Shinya Ozawa, Yohsuke Hosoda, Takemitsu Hasegawa, A new QR factorization method by recursive blocked Gram-Schmidt algorithm and recursive blocked Cholesky factorization, 12th International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics, 22-28 September 2014, Rhodes, Greece

細田陽介、電顕トモグラフィーにおける大規模逆問題の解法、生理研研究会・電子顕微鏡機能イメージングの医学・生物学への応用、平成26年11月12日~13日、生理学研究所・岡崎コンファレンスセンター、愛知県岡崎市

細田陽介、大規模画像復元問題に対する数値計算法の開発、画像逆問題の理論解析研究会、平成26年1月7日~8日、国立天文台・三鷹キャンパス

細田陽介、大規模画像復元問題に対する数値計算法の開発、画像計測研究会2013、平成25年9月5日~6日、核融合科学研究所、岐阜県土岐市

[図書](計0件)

[産業財産権]

出願状況(計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：

国内外の別：

取得状況（計 0 件）

名称：

発明者：

権利者：

種類：

番号：

出願年月日：

取得年月日：

国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

6．研究組織

(1)研究代表者

細田 陽介 (HOSODA, Yohsuke)

福井大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：80264951

(2)研究分担者

長谷川 武光 (HASEGAWA Takemitsu)

福井大学・大学院工学研究科・名誉教授

研究者番号：70023314

(3)連携研究者

()

研究者番号：