

平成 30 年 8 月 2 日現在

機関番号：62615

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K04768

研究課題名(和文) 最小二乗問題の高速解法とその応用

研究課題名(英文) The fast solution of least squares problems and its applications.

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：非負制約付き最小二乗問題を、絶対値変換により制約なしの最小問題を繰り返し解く事に帰着する方法を開発し、その収束性を証明し、優位性を示した。また、同手法を画像修復問題に応用し、その有効性を示した。更に、信号処理等で有用な非負値行列因子分解にも応用し、その優位性を示した。半正定値対称な行列を係数行列とする最小二乗問題に対して、右前処理MINRES法が破綻なく収束することを示し、Eisenstat-SSOR法を右前処理に用いる手法を提案し、その優位性を示した。我々が提案した内部反復前処理クリロフ部分空間解法を、線形計画問題の主双対内点法の各反復で生じる最小二乗問題に適用し、その有効性を示した。

研究成果の概要(英文)：We developed a method for nonnegative least squares problems by using a modulus transformation which reduces the problem to solving a sequence of unconstrained least squares problems, proved its convergence and showed its superiority. We also applied the method to image restoration problems and showed its effectiveness. Further, we applied it to nonnegative matrix factorization (NMF), which is useful in signal processing etc., and showed its superiority. We showed that the right preconditioned MINRES method converges without breakdown for least squares problems whose coefficient matrix is symmetric positive semidefinite, and proposed using the Eisenstat-SSOR method for the right preconditioning, and showed its superiority. We applied our inner iteration preconditioned Krylov subspace method to least squares problems arising in each iteration of the primal-dual interior point method for linear programming problems, and showed its effectiveness.

研究分野：数値解析

キーワード：最小二乗問題 クリロフ部分空間法 非負制約付き最小二乗問題 画像復元 非負値行列因子分解 線形計画問題 共役勾配法 主双対内点法

1. 研究開始当初の背景

我々は既に内部反復前処理を用いた大規模最小二乗問題の反復解法を開発していた(1,2)。

また、特異で非対称な連立一次方程式に対する解法(GMRES 法)の収束理論を確立していた(3)。

さらに、薬物動態モデルのパラメタ推定のために、劣決定逆問題に対する Cluster Newton 法を開発していた(4)。

2. 研究の目的

我々が開発した内部反復前処理を用いた大規模最小二乗問題の反復解法(1,2)をもとに、大規模な非負および箱型制約のついた最小二乗問題の反復解法を開発し、その画像再構成などへの応用を行う。また、非線形最小二乗問題や、線形計画問題の内点法による解法に応用する。

さらに、特異系、特に対称半正定値および不定値な系に対する前処理付き反復解法を開発し、電磁界解析など、偏微分方程式の離散近似解法へ応用する

また、Cluster Newton 法を薬学の実場面へ応用し、手法を改良するとともに、他分野の問題に適用する。

3. 研究の方法

非負制約付き最小二乗問題に関しては、絶対値変換を用いて制約なしの問題を繰り返し解く問題に変換し、各制約なしの最小二乗問題は共役勾配法(CGLS 法)で解く方針を立て、ランダムな行列および画像再構成問題の例で数値実験により従来法と比較した。

線形計画問題の主双対内点法への我々の最小二乗問題の反復法の応用に関しては、内点法に詳しい土谷隆教授と共同研究を行い、従来法と数値実験により比較を行った。

対称半正定値問題の反復解法に関しては、

対称正定値な右前処理行列を計量とした内積を導入することにより「対称化」を行い、MINRES 法を適用した。前処理としては、行列ベクトル積を節約できる Eisenstat-SSOR 法を用いた。手法の評価には、ベンチマーク行列や、辺要素を用いた電磁界解析で生じる対称半正定値問題を用いて従来法と比較した。

Cluster Newton 法の実用化と改良に関しては、WHO の青木康憲研究員および理化学研究所の杉山研究室と共同研究を行った。

4. 研究成果

我々は、非負制約付きの最小二乗問題を、絶対値を用いて制約なしの変数に関する不動点問題に変換して共役勾配法による内部反復を用いて解く反復解法を開発した。更に、この手法を改良した。具体的には、同手法を用いて変数が 0 の値をとる active set とそうでないものに分類し、次に 0 値をとらない変数に限定して射影勾配法を適用することにより高速化し、その収束性を理論的に示した。その結果、従来法より頑健で高速であることを、様々な非負制約付きの最小二乗問題での数値実験により示した。さらに、提案手法を画像修復問題に応用し、従来法より良い修復画像が得られることを示した。これらの成果をまとめた英論文がトップジャーナルに掲載された[3]。また、同手法とチコノフの正則化を画像復元に応用した共著英論文が掲載された[2]。

さらに、信号処理で有用な非負値行列因子分解(Nonnegative Matrix Factorization, NMF)の交互最小二乗法の各反復が多数の右辺項に対する非負制約付き最小二乗問題であることに着目し、我々の手法を応用し、多数の右辺に対する active-set 法を提案することにより高速化し、従来法よりも優れていることを数値実験により確認した()。

現在英論文を執筆中である。

一方、箱型制約のついた最小二乗問題の反復解法については、非負制約の場合の絶対値変換を拡張した手法を開発し、初期的な成果を得た()。

半正定値対称な行列を係数行列とする最小二乗問題に対して、右前処理 MINRES 法が破綻なく収束することを証明し、Eisenstat-SSOR 法を用いた右前処理を用いることにより、従来法より高速に、頑健に解くことができることを、電磁界解析で生じる系などの数値実験により示した。また、収束が停滞した場合に現在の解を初期解として再出発することにより解の精度を改善できることを数値実験により検証した。これらの成果をまとめた和文論文誌が掲載された[4]。さらに、右辺が係数行列の像空間に含まれない場合の証明も加えた英論文を投稿し、現在査読結果に基づいて微修正中である。

我々が提案した最小二乗問題の内部反復前処理クリロフ部分空間解法を、線形計画問題の主双対内点法の各反復で生じる劣決定の連立一次方程式の解法に適用し、ランク落ちや悪条件の場合にも頑健に解けることを示した。特に、幅広いベンチマーク問題に対して、直接法や反復法を用いる多くの公開プログラムと比較し、提案手法の有効性を示した()。また、成果を英文誌に投稿し、現在査読結果に基づいて修正している。

一方、悪条件の劣決定最小二乗問題に対して、正規方程式を用いて右前処理付き一般化残差最小(GMRES)法を安定に収束させる手法を開発した()。その成果に基づき、現在英論文を執筆中である。

薬物動態モデルのパラメタ推定のための Cluster Newton 法については、薬学の研究者と共同研究を行い、実際の場面を使うことにより、改良すべき点が明らかにな

った。それに基づいて手法を改良し、プログラムを薬学関係者に配布し、使ってもらうとともに、英論文を執筆中である。

<引用文献>

(1) Hayami, K., Yin, J.-F., and Ito, T., GMRES methods for least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 31, No. 5, pp. 2400-2430, 2010.

(2) Morikuni, K., and Hayami, K., Inner-iteration Krylov subspace methods for least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 34, No. 1, pp. 1-22, 2013.

(3) Hayami, K. and Sugihara, M., A geometric view of Krylov subspace methods on singular systems, *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol. 18, pp. 449-469, 2011.

(4) Aoki, Y., Hayami, K., De Sterck, H. and Konagaya, A., Cluster Newton method for sampling multiple solutions of an underdetermined inverse problem: Parameter identification for pharmacokinetics, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 36, No. 1, pp. B14-B44, 2014.

5 . 主な発表論文等

{ 雑誌論文 }(計7件)

[1] Marin, J., Mas, J., Guerrero, D., and Hayami, K., Updating preconditioners for modified least squares problems, *Numerical Algorithms*, Vol. 75, pp. 491-508, 2017.
<http://link.springer.com/article/10.1007/s11075-017-0315-z>

[2] Bai, Z.-Z., Buccini, A., Hayami, K., Reichel, L., Yin, J.-F., and Zheng, N., A

modulus-based iterative method for constrained Tikhonov regularization, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 319, pp.1-13, 2017.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2016.12.023>

[3] Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus-type inner outer iteration methods for nonnegative constrained least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 37, No. 3, pp. 1250–1278, 2016.

<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/141002220>

[4] 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, pp. 124-166, 2016.

https://www.jstage.jst.go.jp/article/j-siamt/26/2/26_124/_pdf

[5] Xu, W., Zheng, N., and Hayami, K., Jacobian-free implicit inner-iterative preconditioner for nonlinear least squares problems, *Journal of Scientific Computing*, Vol. 68, pp. 1055-1081, 2016.

<http://link.springer.com/article/10.1007/s10915-016-0167-z>

[6].Gaudreau, P., Hayami, K., Aoki, Y., Safoui, H., and Konagaya, A., Improvements to the Cluster Newton method for underdetermined inverse problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 283, pp. 122-141, 2015.

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042715000266>

doi:10.1016/j.cam.2015.01.014

[7] Morikuni, K. and Hayami, K., Convergence of inner-iteration GMRES methods for rank-deficient least squares

problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 36, No. 1, pp. 225–250, 2015.

<http://epubs.siam.org/doi/pdf/10.1137/130946009>

[学会発表](計 44 件)

Zheng, N., Hayami, K., and Ono, N., Fast Solution of Nonnegative Matrix Factorization Via a Matrix-Based Active Set Method, MS95 Matrix Computations with Applications - Part I of II, 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Waseda University, Tokyo, March 7-10, 2018.

Liao, Z. and Hayami, K., Stabilized GMRES method using the normal equation approach for highly ill-conditioned problems, 日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第 24 回研究会, 東京大学工学部, 2017 年 11 月 24 日.

Sugihara, K., Zheng, N., and Hayami, K., Right Preconditioned MINRES for Singular Systems, 5th IMA Conference on Numerical Linear Algebra and Optimization, September 7-9th, 2016, University of Birmingham, U.K.

Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus-Based Iteration Methods for Nonnegative and Box Constrained Least Square Problems (Invited talk), The Sixth China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics, National Institute for Mathematical Sciences (NIMS), Daejeon, Korea, August 22-26, 2016.

Morikuni, K., Cui, Y., Tsuchiya, T., and Hayami, K., Implementation of Interior-Point Methods for LP using Krylov Subspace Methods Preconditioned by Inner Iterations, The Fifth International Conference on

Continuous Optimization (ICCOPT), Tokyo, August 6-11, 2016.

Marin, J., Mas, J., and Hayami, K., Updating preconditioners for least squares problems, Mini Symposium: Recent Advances in the Solution of Least Squares Problems, 20th Conference of the International Linear Algebra Society (ILAS) KU Leuven, Belgium, July 15, 2016.

Zheng, N., Hayami, K., Yin, J., Modulus Iterative Methods for Nonnegative Constrained Least Squares Problems Arising from Image Restoration, SIAM Conference on Image Science, Albuquerque, USA, May 23-26, 2016.

Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus-Type Inner Outer Iteration Methods for Nonnegative and Box Constrained Least Squares Problems and their Application to Image Restoration (Invited Talk), The 1st Asia-Pacific Workshop on Image Processing and Applications, Macquarie University, Sydney, Australia, December 14-16, 2015.

Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus Methods for Box Constrained Least Squares Problems, (Invited Lecture)

京都大学数理解析研究所 (RIMS) 研究集会: 現象解明に向けた数値解析学の新展開 京都大学数理解析研究所, 2015年11月18-20日.

Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus Iterative Methods for Least Squares Problems with Box Constraints, in Minisymposium MS43: The Least Squares Challenge: Modern Methods and

Applications, 2015 SIAM Conference on Applied Linear Algebra, October 26-30th, 2015, Atlanta, Georgia.

Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus Iterative Methods for Box Constrained Least Squares Problems, Minisymposium on Recent Advances in the Solution of Least Squares Problems 2, The International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2015), Beijing, August 10-15, 2015.

〔図書〕(計1件)

速水 謙, ギルバート・ストラング著, 日本応用数学会監訳, 今井桂子・岡本久監訳幹事, 世界標準 MIT 教科書 ストラング: 計算理工学, 近代科学社, 第7章 大規模連立一次方程式一次方程式の解法, pp. 549-591, 2016. (Gilbert Strang, Computational Science and Engineering, Second Printing, Wellesley-Cambridge Press, 2012の翻訳)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

〔その他〕

ホームページ等
<https://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