

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 9 月 28 日現在

機関番号：62615

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560082

研究課題名(和文) 最小二乗問題の反復解法と逆問題への応用

研究課題名(英文) Iterative Methods for Least Squares Problems and their Application to Inverse Problems

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)：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、科学、工学などでの基本的な問題である。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。さらに、未知数の範囲に制約がある問題や、非線形な問題の解法も開発した。また、排せつ物の時間経過から患者の体内での薬の効き方を推定するモデルのパラメータを同定する逆問題の解法を開発した。

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. They are fundamental problems in science and engineering etc. 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. Further, we developed methods for solving problems with constraints on the unknowns, and also nonlinear problems. We also developed methods for solving inverse problems where the parameters of how medicine becomes effective in the patient's body, from how the excretion varies with time.

研究分野：数値解析, 数値線形代数, 逆問題

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

1. 研究開始当初の背景

- (1) 大規模で条件が悪い、またランク落ち下最小二乗問題に対して従来有効な反復解法がなかったため、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) 非負制約や箱型制約の付いた最小二乗問題に対して、従来は Newton 法的な手法を用い、適切なステップ・サイズで解を更新する非線形最適化の手法が主流であった。
- (3) 従来の非線形最小二乗問題の反復解法ではヤコビアン (目的関数の勾配) の計算に多大な時間がかかり、また各反復で解く最小二乗問題に対して有効な前処理法が用いられていなかった。
- (4) 対称で特異な連立一次方程式に対するクリロフ部分空間型解法に対する有効な前処理法がなかった。
- (5) 薬物動態モデルのパラメータを推定する劣決定逆問題では未知パラメータの数より、観測データの数のほうが少ないので、解は無数にあり、その中からより詳細な時間経過のデータを用いて適切な解を見出す方法がなかった。

2. 研究の目的

- (1) 大規模で条件が悪い、またランク落ち下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こと。
- (2) 非負制約や箱型制約の付いた最小二乗問題に対して数値線形代数的な手法により高速解法をあたえること。
- (3) 大規模な非線形作用二乗問題を高速、小メモリーで解く手法を開発すること。
- (4) 対称で特異な連立一次方程式に対するクリロフ部分空間型解法に対する有効な前処理法を開発すること。
- (5) 劣決定逆問題の無数の解の中からより詳細な時間経過のデータを用いて適切な解を見出す方法を開発すること。

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) 非負制約や箱型制約の付いた最小二乗問題を、等価な線形相補性問題 (LCP) に変換してから、絶対値を用いた反復解法を適用する新しい解法を提案した。

- (3) 高速自動微分と重みつきヤコビ内部反復前処理を用いた。
- (4) 問題の等価性を保つ右前処理を採用し、特に Eisenstat-SSOR 法による前処理を用いた。
- (5) 以前に提案した Cluster Newton 法において、毎反復で解候補の集団をベータ分布を用いて発生し、追加された観測結果に最も近い値を与える解 (パラメータ) を絞り込んだ。これにより、従来複数 (多数) 求まっていた解の中から最も観測データに合うものを合理的に求めることができた。

4. 研究成果

- (1) **内部反復前処理 GMRES 法による最小二乗問題の反復解法**を開発し、優決定、劣決定、悪条件問題、ランク落ち問題に対する有効性を理論および数値実験により明らかにした。

さらに、内部反復法として、今まで用いていた SOR (Successive Over Relaxation) 法を一般化した AOR (Accelerated Over Relaxation) 法を用いることにより、更に性能を改善させた。

また、内部反復前処理をした GMRES 法、CG 法、MINRES 法を、線形計画問題を主双対内点法による解法で生じる悪条件な連立一次方程式の解法に適用し、従来の Cholesky 法による直接解法よりも安定に解が求まることを示した。

- (2) **非負制約や箱型制約の付いた最小二乗問題**に対して、等価な線形相補性問題 (LCP) に変換してから、絶対値を用いた反復解法を適用し、さらに内部反復 (制約なしの最小二乗問題に対する) CGLS 法を用いる新しい解法を開発し、その収束性を理論的に示し、従来の射影法より優れていることを数値実験により示した。また、同手法を画像の再構成や、制約付きの不適切問題に適用し、その有効性を示した。

- (3) 高速自動微分を用い、ヤコビアン計算を要しない **非線形最小二乗問題の反復解法**で生じる各反復の線形最小二乗問題に対して、重みつきヤコビ内部反復前処理をした GMRES 法を適用し、その有効性を数値実験により示した。

- (4) **対称特異な連立一次方程式の前処理付き反復解法**として、Eisenstat-SSOR 法による右前処理 MINRES 法を開発し、その有効性を数値実験により示した。

- (5) **劣決定逆問題に対して複数の解を高速に求める Cluster Newton 法**: 薬物動態モデルの逆問題において、薬品や代謝物の血中濃度の時間推移などの追加情報が得られ

た時に、最も適した解を絞り込む新しい手法を開発し、その有効性を数値実験により検証した。同手法は、毎反復で解候補の集団をベータ分布を用いて発生し、追加された観測結果にもっとも近い値を与える解(パラメタ)を絞り込むものである。これにより、従来複数(多数)求まっていた解の中から最も観測データに合うものを合理的に求められるようになり、薬物動態モデルのパラメタ推定において実用的な手法を与えた。

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 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*, 査読有, Vol. 283, pp. 122-141, 2015.
doi.org/10.1016/j.cam.2015.01.014 .
- ② Morikuni, K. and Hayami, K., Convergence of inner-iteration GMRES methods for least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 査読有, Vol. 36, No. 1, pp. 225-250, 2015. <http://epubs.siam.org/doi/pdf/10.1137/130946009>
- ③ 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*, 査読有, Vol. 36, No. 1, pp. B14-B44, 2014.
<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/120885462>
- ④ Morikuni, K., Reichel, L., and Hayami, K., FGMRES for linear discrete ill-posed problems, *Applied Numerical Mathematics*, 査読有, Vol. 75, pp. 175-187, 2013.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.apnum.2013.08.004>
- ⑤ Morikuni, K., and Hayami, K., Inner-iteration Krylov subspace methods for least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 査読有, Vol. 34, No. 1, pp. 1-22, 2013.
<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/110828472>

[学会発表] (計 40 件)

- ① Sugihara, K., 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)」, 2015年3月26-28日, 京都市生涯学習総合センター(京都府・京都市).
- ② Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus-type inner-outer iterative methods for nonnegative constrained least squares problems, (Invited Lecture), Symposium on Iterative Methods and Parallel Computing, The 18th International Conference on Finite Elements in Flow Problems (FEF2015), March 16-18th, 2015, Taipei(Taiwan).
- ③ Morikuni, K., Hayami, K., and Rozloznic, M., Krylov subspace methods preconditioned by inner iterations for rank-deficient least squares problems, Mini Symposium: MS275 Preconditioners for Sparse Least Squares, SIAM Conference on Computational Science and Engineering, March 14-18, 2015, Salt Lake City (USA).
- ④ Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus-Type Inner Outer Iterative Methods for Nonnegative Constrained Least Squares Problems, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 第18回研究会, 2014年12月25日, 東京大学(東京都・文京区).
- ⑤ Cui, Y., Morikuni, K., Tsuchiya, T., and Hayami, K., Application of Inner-iteration Krylov Subspace Method to Linear Programming Problems, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 第18回研究会, 2014年12月25日, 東京大学(東京都・文京区).

- ⑥ 杉原光太, 速水 謙, 実対称特異線形方程式への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, 2014年12月5-7日, 加計学園国際学術交流センター(岡山県・倉敷市).
- ⑦ Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus-type inner-outer iteration methods for nonnegative constrained least squares problems, (Poster presentation), The Fifth International Conference on Numerical Algebra and Scientific Computing (NASC 2014), October 25-29, 2014, Tongji University, Shanghai (China).
- ⑧ Morikuni, K., Rozloznik, M., and Hayami, K., Inner-iteration preconditioning for CG and MINRES-type methods, The Fifth International Conference on Numerical Algebra and Scientific Computing (NASC 2014), October 25-29, 2014, Tongji University, Shanghai (China).
- ⑨ Gaudreau, P., Hayami, K., Aoki, Y., Safoui, H., and Konagaya, A., Improvements to the Cluster Newton Method for Underdetermined Inverse Problems, 生命医薬情報学連合大会 (IIBMP2014), 2014年10月2-4日, 仙台国際センター(宮城県・仙台市).
- ⑩ Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus inner-outer iterative method for nonnegative constrained least squares problems, 日本応用数理学会2014年度年会, 2014年9月3-5日, 政策研究大学院大学(東京都・港区).
- ⑪ Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus iterative methods for least squares problems with nonnegative constraints, The 19th International Linear Algebra Society Conference(ILAS2014), Contributed Minisymposium (CMS6) on Linear least squares and applications, August 6-9, 2014, Sungkyunkwan University, Seoul, (Korea).
- ⑫ Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., (Invited Talk), Modulus Iterative Methods for Least Squares Problems with Nonnegative Constraints, The Third China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications, July 17-18, 2014, School of Mathematics and Statistics, Lanzhou University, Lanzhou(China).
- ⑬ Liu, L., Morikuni, K., Hayami, K., and Yin, J.-F., AOR Inner-Iteration GMRES Method for Least Squares Problems, (Invited Talk), Workshop on Structured Preconditioning and Iterative Methods with Applications, March 24-28, 2014, Tsinghua Sanya International Mathematics Forum (TSIMF), Sanya(China).
- ⑭ Hayami, K., Morikuni, K. and Zheng, N., Fast solution methods for least squares problems and their applications, (Invited Talk), 自然科学研究機構 新分野創成センター・イメージングサイエンス研究分野 「画像逆問題の理論解析研究会」, 2014年1月7-8日, 国立天文台 三鷹キャンパス(東京都・三鷹市).
- ⑮ Liu, L., Hayami, K. and Yin, J.-F., AOR Inner-Iteration GMRES Methods for Least Squares 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16回研究会, 2013年12月26日, 東京大学(東京都・文京区).
- ⑯ Zheng, N., Hayami, K. and Yin, J.-F., Modulus iterative methods for box constrained least squares problems, (Invited Talk), 2013 NCTS Workshop on Numerical Linear Algebra and High Performance Computing (2013 NLA-HPC), December 9-12, 2013, NCTS, National Tsing-Hua University, Hsinchu (Taiwan).
- ⑰ Latt, K. M.-M., Gaudreau, P.J., Hayami, K., Aoki, Y., Safoui, H. and Konagaya, A., Improvements to the Cluster Newton Method for Under-determined Inverse Problems - Parameter Identification for Pharmacokinetics-, Poster presentation, C-4-05, CBI学会2013年大会-生命医薬情報学連合大会-, 2013年10月28-31日, タワーホール船堀(東京都・江戸川区).
- ⑱ 速水 謙, 劣決定逆問題に対する Cluster Newton法と改良 - 薬物動態モデルのパラメータ推定への応用 - (招待講演), 第2回岐阜数理科学研究会, 2013

- 年9月 16-18日, 飛騨高山まちの博物館
研修室(岐阜県・高山市).
- ⑲ Gaudreau, P., Hayami, K., Aoki, Y.,
Safouhi, H., and Konagaya, A.,
Sampling families of solutions using
the Cluster Newton method for an
underdetermined inverse problem:
Parameter identification for
pharmacokinetics, Recent
Developments in Numerical Methods
for Seismic Inverse Problems &
Applications, July 16-18, 2013,
University of Calgary,
Calgary(Canada).
- ⑳ Morikuni, K. and Hayami, K.,
Inner-iteration Krylov subspace
methods for least squares problems,
SIAM Student Paper Prize Winners
Presentation session, 2013 SIAM
Annual Meeting, July 8-12, 2013, San
Diego(USA).
- ㉑ Morikuni, K. and Hayami, K.,
Inner-iteration preconditioners for the
minimum-norm solution of
rank-deficient systems, International
Conference on Preconditioning
Techniques for Scientific and
Industrial Applications, June 19-21,
2013, Oxford(UK)..
- ㉒ Gaudreau, P., Hayami, K., Aoki, Y.,
Safouhi, H. and Konagaya, A.,
Sampling Families of Solutions using
the Cluster Newton Method for an
Underdetermined Inverse Problem:
Parameter Identification for
Pharmacokinetics, 第 42 回数値解析シ
ンポジウム, 2013 年 6 月 12-14 日, 松山
道後温泉 道後館(愛媛県・松山市).
- ㉓ Morikuni, K. and Hayami, K.,
Inner-iteration preconditioning for
the minimum-norm solution of
rank-deficient linear systems, The
18th Conference of the International
Linear Algebra Society (ILAS 2013),
June 3-7, 2013, Providence(USA).
- ㉔ 速水 謙, 保國恵一, 最小二乗問題と
反復解法(招待講演), 日本応用数理学
会 3 部会連携応用数理セミナー,
2012 年 12 月 25 日, 東京大学工学部(東
京都・文京区).
- ㉕ Morikuni, K. and Hayami, K., GMRES
methods with inner iterations for least
squares problems, The Fourth
International Conference on
Numerical Algebra and Scientific
Computing (NASC2012), October
20-24, 2012, Dalian, China.
- ㉖ Morikuni, K. and Hayami, K.,
Inner-iteration GMRES methods for
least squares problems, 3rd
Dolomites Workshop on Constructive
Approximation and Applications
(DWCAA12), Session on
Approximation Methods in Numerical
Linear Algebra, September 9-14, 2012,
Alba di Canazei, Italy.
- ㉗ 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,
平成 24 年 電気学会 電子・情報・システム
部門大会, 2012 年 9 月 5 日-7 日, 弘前大学
(青森県, 弘前市).
- ㉘ Nawar, R., Hayami, K., and Morikuni,
K., Inner iterations for generalized
minimal residual (GMRES) methods
with numerical performance, 日本応用
数理学会 2012 年度年会, 2012 年 8 月 28
日-9 月 2 日, 稚内全日空ホテル(北海道・
稚内市).
- ㉙ Morikuni, K. and Hayami, K.,
GMRES methods preconditioned with
inner iterations for general least
squares problems, 日本応用数理学会
2012 年度年会, 2012 年 8 月 28 日-9 月 2
日, 稚内全日空ホテル(北海道・稚内市).
- ㉚ Morikuni, K. and Hayami, K., SOR
inner-iteration GMRES for
underdetermined least squares
problems, Minisymposium MS 34.
Least squares methods and
applications, 2012 SIAM Conference
on Applied Linear Algebra, June,
2012, Universitat Politècnica de
València, Valencia(Spain).

〔図書〕(計 1 件)

速水 謙, (薩摩順吉, 大石進一, 杉原正顯
編), 朝倉書店, 応用数理ハンドブック,
「最小二乗問題の数値解法」の項目, 2013,
pp. 416-417.

〔産業財産権〕

○出願状況(計 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 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

<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