

令和 4 年 6 月 10 日現在

機関番号：32678

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K18064

研究課題名（和文）線形反復ソルバーに対する平滑化技術の革新と最適化アルゴリズムへの応用

研究課題名（英文）Innovations in the smoothing technique for linear iterative solvers and its application to optimization algorithms

研究代表者

相原 研輔（Aihara, Kensuke）

東京都市大学・情報工学部・准教授

研究者番号：70735498

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,600,000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に有効な反復ソルバー群である。本研究では、その収束振る舞いを滑らかにするための平滑化技術を改良し、近似解の精度向上といった付加価値のある新しい計算スキームを開発した。また、いくつかの積型BiCG法を統一的に扱うことのできるGPBiCGstab(L)法という新たなフレームワークを構築した。さらに、リーマン多様体上の最適化アルゴリズムについて、クリロフ部分空間法によるニュートン方程式の効率的な求解や、行列分解に基づく新しいレトラクション手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

大規模行列に関する数学的諸問題をコンピュータにより高速かつ高精度に解くための数値計算アルゴリズムの研究は、現代の科学技術計算において必要不可欠なものである。本研究は、その中でも最も基本的かつ重要な問題である連立一次方程式に着目し、既存手法の改良や新しい手法の開発を行ったものである。平滑化手法の革新や効果的な最適化アルゴリズムの確立といった本研究の成果は、関連する諸分野の発展に大きく貢献するものと考えられる。

研究成果の概要（英文）：Krylov subspace methods are effective iterative solvers for large linear systems of equations. In this study, we have improved the smoothing technique for obtaining a smooth convergence behavior of the iterative methods. This new smoothing scheme enables the accuracy of the approximate solutions to be improved. We have also proposed a new framework named GPBiCGstab(L) which unifies several algorithms of the hybrid BiCG methods. Furthermore, we have studied on Riemannian optimization. We have developed an efficient Newton's method, where Newton's equation is solved efficiently using the Krylov subspace methods, and also designed a new retraction scheme based on the matrix decomposition.

研究分野：数値線形代数，数理最適化

キーワード：大規模連立一次方程式 最適化 ニュートン法 クリロフ部分空間法 レトラクション 平滑化技術 丸め誤差解析 積型BiCG法 リーマニアン

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

様々な科学技術計算で現れる大規模な連立一次方程式を高速かつ高精度に解くための手法として、反復ソルバーは重要な役割を担っている。現在の主流は、線形部分空間を広げながら解を探索する反復ソルバー群であるクリロフ部分空間法であり、係数行列の構造や問題の規模に合わせて多種多様なアルゴリズムが開発されている。ここで、アルゴリズム開発においては、次の2つの性質が重要となる。

(A) 近似解の反復列が単調かつ安定に解に収束するよう、誤差や残差を反復毎に最小化する。

(B) 1反復あたりの演算量やメモリ量を抑えるため、近似解や残差を短い漸化式で更新する。しかし、一般の行列に対して、これらの良い性質を兼ね備えたアルゴリズムは構築できないことが知られている。そこで、(A)か(B)のいずれかを採用し、もう一方の性質を別のアプローチから擬似的に再現することで、収束性と計算コストのバランスを図る手法の開発が重要な課題となっている。特に、近年では問題の大規模化に伴い、(B)の性質を持ちつつ、数値的にも安定した収束性をもつソルバーが望まれている。積型 BiCG 法と呼ばれる反復列の双直交化に基づくソルバー群は、一般の行列に対して(B)の性質を備えた有効な手法であるが、反復列が大きく振動する場合があるなど、収束の振る舞いは不規則となるため、適切な改良が必要である。

積型 BiCG 法に対しては、残差の反復列に適切な変換を施し、収束の振る舞いが滑らかな反復列を生成する「平滑化」の技術が有効である。平滑化は実装が簡単でとても扱いやすいことから、古くから利用されている。ただし、古典的な平滑化は、あくまで収束の“振る舞い”を滑らかにするものであり、丸め誤差の影響を抑制したり、収束性を向上させたりするような都合の良い効果はないことも知られていた。しかし申請者らは、過去の研究過程において、従来とは異なる計算スキームで平滑化を行うと、丸め誤差の影響による残差の停滞などを回避し、得られる近似解の精度が大幅に改善される場合があることを数値実験により確認した。そこで、平滑化に対する従来の認識を改め、その計算スキームを適切に改良することで、結果的に(A)と(B)の両方の性質をバランスよく兼ね備えた新しい反復ソルバーを開発することができると考えた。

2. 研究の目的

本研究の主たる目的は、反復列の平滑化に関して、従来の計算スキームやその効果を見直し、数値的安定性の向上に向けた新しい平滑化手法を開発することである。より具体的には、従来のような収束の振る舞いの改善だけではなく、計算機上に実装する際に生じる丸め誤差の影響を抑制し、近似解の精度向上などを達成する。

また、新しい計算スキームはその適用範囲を限定することなく、できる限り汎用的に使用できる形式を目指す。特に、反復ソルバーの各種のアルゴリズムに依存させないことはもちろん、対象とする問題も標準的な連立一次方程式に限らず、例えば精度の良い近似解の生成が困難とされている複数の右辺ベクトルをもつ系への適用なども視野に入れる。

さらに、申請者らはこれまでに、行列の分解などに関連するリーマン多様体上の最適化手法の研究にも取り組んできたことから、本研究の最適化アルゴリズムへの応用についても合わせて検討する。

3. 研究の方法

古典的な平滑化では、反復ソルバーで得られる反復列の線形結合により、振る舞いの滑らかな別の反復列を生成する。このとき、平滑化した反復列は元の反復列に蓄積された丸め誤差の影響をそのまま受け継いでしまう。そこで本研究では、アルゴリズム中に現れる行列ベクトル積などの計算で生じる丸め誤差の影響を十分に解析し、平滑化前後の反復列が丸め誤差の影響を抑制するように相互作用するような新しい計算スキームを構築する。また、平滑化は数学的な等価性を維持したまま異なる形式で実装することが可能であるため、積型 BiCG 法の各種のアルゴリズムに適合するように実装を工夫し、計算スキームの汎用性を高める。同時に、複数の右辺ベクトルをもつ問題への拡張を目指す。

最適化アルゴリズムに対しては、例えば次のような応用が考えられる。リーマン多様体上のニュートン法の二次収束性を維持するためには、反復毎に現れるニュートン方程式の求解精度を高める必要がある。このとき、反復ソルバーを用いることで求解精度を調整することはできるが、確実に要求精度を満たすための高い数値的安定性の確保と無駄のない滑らかな収束性を保持することが重要となる。これを達成するため、本研究で扱う平滑化のアプローチを応用する。

なお、以上の研究は、必ずしも個々の目的を達成することだけを考えるのではなく、それぞれの研究を並行して行うことで、結果的に線形計算分野と数値最適化分野の相互の発展に向けた新しい展開を見出すことを視野に入れ、研究の方向性を柔軟に修正する。

4. 研究成果

まず、平滑化に関しては、計算機上で生じる丸め誤差の解析と、それに基づくアルゴリズムの改良に取り組み、平滑化前後の反復列が相互作用する新しい計算スキームを定式化した。特に、行列ベクトル積やベクトルの更新過程において生じる丸め誤差の影響を抑制できることを理論的に示し、収束の振る舞いだけでなく、近似解の精度向上といった付加価値を得ることができた。研究成果は、国内外の学会にて口頭発表するとともに、学術論文として京都大学数理解析研究所講究録および国際的な学術雑誌 BIT Numerical Mathematics に掲載された。本研究成果は平滑化に関する従来の認識をある意味で覆すものであり、当該分野におけるインパクトは大きく、国内外の関連研究への波及効果も期待されるものである。

開発した平滑化の計算スキームは、ある程度の汎用性をもつ形式ではあるが、一方で積型 BiCG 法のアルゴリズム一つ一つに適合させるには、実装において個々に若干の修正を施さなければならない。その解決策を検討する中で、逆に複数の積型 BiCG 法を統一的に扱えるような仕組みを構築することの重要性を感じ、研究の方向性を転換した。実際に、積型 BiCG 法の種々のアルゴリズムの統一化を図る既存研究も多数あるため、それらを発展させることに取り組んだ。具体的には、積型 BiCG 法として従来からよく知られたアルゴリズムである BiCGstab(L)法と GPBiCG 法（これらは複数のパラメータを含み、異なるフレームワークとして解釈できる）に着目し、これら 2 つを融合したより統一的なアルゴリズム（GPBiCGstab(L)法と命名）を構築した。数値実験を通して、従来よりも優れた収束をもつことも示している。この成果は平滑化そのものの改良ではないが、GPBiCGstab(L)法に平滑化を組み込むことで、様々な変種をカバーすることが可能となった。研究成果は、国内外の学会にて口頭発表するとともに、学術論文として国際的な学術雑誌 Numerical Linear Algebra with Applications に掲載された。また、本研究成果を含む近年の積型 BiCG 法の発展をまとめた解説論文を日本応用数学会機関誌「応用数理」に寄稿し、2021 年度ベストオーサー賞（論文部門）を授与された。積型 BiCG 法は現在も様々な科学技術計算において活用されているため、関連する応用分野への貢献度も大きいと考える。

次に、平滑化の拡張に関しては、複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式への適用に向けた研究を行った。具体的には、行列方程式に有効とされるグローバル・クリロフ部分空間法およびブロック・クリロフ部分空間法に着目し、これらに対して同様に平滑化を行う手法を考案した。丸め誤差解析と数値実験を通してその有効性を示し、研究成果の一部を国内外の学会にて口頭発表するとともに、関連論文をプレプリント・サーバ arXiv に公開した。研究成果の発信と普及については、今後の継続課題である。

最後に、リーマン多様体上の最適化アルゴリズムに関する研究成果を述べる。まず、グラスマン多様体上の最適化に有効なニュートン法を構築した。本手法では、アルゴリズム中に現れるニュートン方程式にクリロフ部分空間法の一つである CR 法を適用することで、従来よりも効率的な実装を可能とした。CR 法は対称性をもつニュートン方程式に対しては残差の単調減少性を保持できるアルゴリズムであるため、あらためて平滑化を行う必要性はないが、CR 法の適用に関しては前述の平滑化の研究から着想を得たものである。研究成果は、国内の研究会にて口頭発表するとともに、日本応用数学会論文誌に掲載され、当該論文は日本応用数学会 2019 年度論文賞（理論部門）を授与された。また、本研究に取り組む中で、近似解の更新に用いるレトラクションと呼ばれる写像に改良点を見出した。具体的には、一般化シュティーフエル多様体上の最適化において、コレスキー QR 分解を応用した効率的なレトラクションの計算方法を導出した。数値実験を通して、大規模問題に対して従来よりも大幅な高速化を達成することができた。研究成果は国内の学会等にて口頭発表するとともに、学術論文として国際的な学術雑誌 Computational Optimization and Applications に掲載された。既に国内外の複数の論文から引用されており、注目を得ている。以上の研究では、当初に計画した平滑化そのものの応用には至らなかったものの、線形計算とリーマン多様体上の最適化との関連について研究協力者と議論を重ねたことで、新たな研究の方向性を見出すことができた。本研究で得た知見をもとに、リーマン多様体上の最適化アルゴリズムのさらなる高速化や高精度化に今後も取り組む予定である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Kensuke Aihara, Akira Imakura, Keiichi Morikuni	4. 巻 2106.00284
2. 論文標題 Cross-interactive residual smoothing for global and block Lanczos-type solvers for linear systems with multiple right-hand sides	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 arXiv [math.NA]	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.48550/arXiv.2106.00284	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 相原 研輔	4. 巻 30
2. 論文標題 連立一次方程式に対する積型Bi-CG法の発展	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 応用数理	6. 最初と最後の頁 16~23
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.11540/bjsiam.30.3_16	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Kensuke Aihara	4. 巻 27
2. 論文標題 GPBi-CGstab(L): A Lanczos type product method unifying Bi-CGstab(L) and GPBi-CG	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Numerical Linear Algebra with Applications	6. 最初と最後の頁 e2298
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/nla.2298	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Kensuke Aihara, Ryosuke Komeyama, Emiko Ishiwata	4. 巻 59
2. 論文標題 Variants of residual smoothing with a small residual gap	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 BIT Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 565--584
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10543-019-00751-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroyuki Sato, Kensuke Aihara	4. 巻 72
2. 論文標題 Cholesky QR-based retraction on the generalized Stiefel manifold	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computational Optimization and Applications	6. 最初と最後の頁 293--308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10589-018-0046-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 佐藤 寛之, 相原 研輔	4. 巻 28
2. 論文標題 グラスマン多様体上の商構造を用いたニュートン法	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 日本応用数学会論文誌	6. 最初と最後の頁 205--241
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11540/jsiamt.28.4_205	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 相原 研輔	4. 巻 2094
2. 論文標題 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	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 京都大学数理解析研究所講究録	6. 最初と最後の頁 112--121
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計15件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 Kensuke Aihara, Akira Imakura, Keiichi Morikuni
2. 発表標題 On the Residual Gap of Block Lanczos-Type Methods and Its Remedy by Cross-Interactive Residual Smoothing
3. 学会等名 SIAM Conference on Applied Linear Algebra (LA21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 相原 研輔, 今倉 暁, 保國 恵一
2. 発表標題 Sylvester方程式に対するglobal Krylov部分空間法のresidual gap評価とその改善
3. 学会等名 日本応用数理学会2021年研究部会連合発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 相原 研輔, 今倉 暁, 保國 恵一
2. 発表標題 漸化式に着目したblock Krylov部分空間法のresidual gap評価と残差スムージング
3. 学会等名 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30回研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 相原 研輔
2. 発表標題 残差スムージングによるGlobal Krylov部分空間法の収束性改善
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 相原 研輔, 佐藤 寛之
2. 発表標題 一般化Stiefel多様体上のCholesky QR分解に基づく高速・高精度なレトラクション
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会2020年春季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 相原 研輔
2. 発表標題 Global Krylov部分空間法に対する相互作用型残差スムージング
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年研究部会連合発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kensuke Aihara
2. 発表標題 GPBi-CGstab(L): a Lanczos-type product method unifying Bi-CGstab(L) and GPBi-CG
3. 学会等名 9th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 相原 研輔, 佐藤 寛之
2. 発表標題 一般化シュティーフェル多様体におけるレトラクションの諸性質
3. 学会等名 第48回数値解析シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 相原 研輔
2. 発表標題 積型Bi-CG法における包括的な安定化多項式の提案
3. 学会等名 日本応用数理学会2019年研究部会連合発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤 寛之, 相原 研輔
2. 発表標題 リーマン多様体上の最適化におけるレトラクションの理論と応用
3. 学会等名 日本応用数理学会2019年研究部会連合発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 相原 研輔
2. 発表標題 Bi-CGstab(ell)法とGPBi-CG法を融合した積型Bi-CG法について
3. 学会等名 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26回研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 相原 研輔
2. 発表標題 短い漸化式を用いるクリロフ部分空間法に対する残差スムージング
3. 学会等名 数値解析セミナー #108
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 相原 研輔
2. 発表標題 相互作用型の残差スムージングによる積型BiCG法の収束性改善
3. 学会等名 日本応用数理学会2018年度年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤 寛之, 相原 研輔
2. 発表標題 グラスマン多様体上の商構造に基づくニュートン方程式とその解法
3. 学会等名 第47回数値解析シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kensuke Aihara
2. 発表標題 Smoothed variants of hybrid Bi-CG methods for solving large sparse linear systems
3. 学会等名 SIAM Conference on Applied Linear Algebra (SIAM-ALA18) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

相原研輔のホームページ http://www.comm.tcu.ac.jp/aiharak-sc/index.html
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	佐藤 寛之 (Sato Hiroyuki)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------