様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２６ 年　 ６ 月 １１ 日現在

機関番号：３２６１２
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2011～2013
課題番号：２３６５４０４０
研究課題名（和文）クラウドコンピューティングによる大規模な離散逆問題の新しいＧＭＲＥＳ型算法の構築

研究課題名（英文）New GMRES algorithm for solving large scale inverse problems on a cloud computing

研究代表者
野寺　隆（Nodera, Takashi）

慶應義塾大学・理工学部・教授

研究者番号：５０１５６２１２

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　2,700,000円、（間接経費）　810,000円

研究成果の概要（和文）：離散型線形悪条件問題に対する正則化手法として，GMRES法に注目し，GMRES 法の適用過程で現れる各値を用いた制約条件を付加することで，問題の非適切性の改善を試みた研究である．
GMRES 法による正則化の過程は，(1)GMRES法によって連立1次方程式の近似解を生成し，(2)制約条件を用いて最適な近似解を決定する，2ステップに分けられる．(1)においては，GMRES 法を離散型線形悪条件問題に適用した特徴的な振る舞いについて考察し，(2)近似解決定の制約条件として，Simplified Tikhonov 閾値を提案し，数値実験により有効性を示した．

研究成果の概要（英文）：GMRES regularization method is arguably the most popular solution for linear discrete ill-posed problems. We explores different regularization methods as a means of yielding stable solutions for linear discrete ill-posed problems.
The regularization with GMRES must be implemented in two stages, which are designed to generate an approximate solution of a linear system through the use of GMRES, and to determine the most appropriate solution by using a constraint. In the first stage, particular behaviors of GMRES and preconditioned GMRES for linear discrete ill-posed problems are identified. In the second stage, a simplified Tikhonov threshold as a constraint to determine the best approximate solution is explored. Numerical experiments have been tabulated to underline the effectiveness of our proposed method.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・数学一般（含確立論・統計数学）

キーワード：非適切な問題　離散型悪条件問題　逆問題　GMRES　Krylov部分空間　Tikhonov正則化　制約条件　augmentation

１．研究開始当初の背景

近年，離散型線形悪条件問題に対する正則化手法として GMRES 法が注目を集めている．離散型線形悪条件問題は，逆問題などで多く見られる非適切な問題を表すモデル方程式の離散化による連立 1 次方程式である．応用分野は，石油探査や重力測定，衛星写真や医用画像の復元等と幅広く，古くから活発な研究が行われている．ここで，非適切な問題とは，Hadamard の定義した良条件問題のための三条件を満たさない問題のことである．本研究は，非適切な問題から生じる連立 1 次方程式に対し，クラウドコンピューティングに対して、効率よく安定して近似解を計算するために，近似解の安定を図る正則化手法について提案し，ソルバーとして安定して利用可能な算法の開発を行うことが狙いである．

２．研究の目的

第一種Fredholm積分方程式の離散化から導かれる連立1次方程式に対してGMRES法を適用する場合に，近似解決定の新たな閾値を提案し，GMRES法の新しい反復アルゴリズムを構成する．

第一種Fredholm積分方程式とは，逆問題の1つとして知られ，離散型線形悪条件問題に分類される．対象となる問題は幅広く，近年活発に研究が行われている．悪条件問題の近似解を求めるには，問題自身が解決すべき様々な困難な性質を持っているため，ソルバーを実装するには，克服すべき点が多数残っている．今回，提案する閾値は，古典的な手法の1つであるTikhonov正則化に注目し，簡単に計算可能な新しい閾値を提案したものであり，従来用いられている残差ノルムに比べ，解の精度，近似解の決定の面で有利に働く．

本研究は，新しい算法の導出と実装による逆問題の精度のよい近似解を求めるクラウドコンピューティングによるソフトウェアの構築を目的としている．

GMRES 法は，Saad et al.[SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol.7, pp.859-869, (1986)] において提案され，正則で大規模な非対称行列を係数とする連立１次方程式（Ax=b）に対する反復解法の１つである．本研究は，離散型線形悪条件問題の１つである，第一種 Fredholm 積分方程式から導かれる連立１次方程式（係数行列の条件は大変悪い）を対象とし，GMRES 法を適用する際に精度のよい近似解を得られる新しい改良版を提案する．

３．研究の方法

3.1 平成 23 年度

大規模な行列計算に必要な基本算法の数学的な理論研究と MIMD 型の並列計算機へ実装するために，従来から存在する行列計算ソフトの比較研究開発を行った．主に，C-言語や C++，JAVA を使って新しい算法をプログラミングし，クラウドコンピューティングに適したソルバーの開発環境の構築を試みた．

3.2　平成 24 年度

現実問題を踏まえた悪条件を持つ逆問題を，我々の開発した適応的なソルバーを使って本格的な数値実験を行うための準備を行った．特に，近似解の精度などの誤差解析を行い，現実問題に対する提案した算法の正当性を評価し、残差ノルムの可視化やパラメータや係数（ステップサイズ）の可視化を行う GUI の検討を行い，Krylov 部分空間に基づく非対称行列系の高速反復解法の総合的なソルバーを構成した．

3.3　平成 25 年度

開発したプログラムの整合性や使用方法の調整を行った．さらに，適応的な算法の手法として，Krylov 部分空間に新しい空間要素を補う augmentation による関数の付加を考えるだけでなく，係数行列の最小固有値によるデフレーション（deflation）の有効性についても理論的な応用だけでなく，数値実験によって離散化逆問題の近似解の計算にも利用できることを確かめた．

４．研究成果

(1) GMRES 法によって連立１次方程式の近似解の生成：GMRES 法や前処理つきの GMRES 法を離散型線形悪条件問題に適用した場合の特徴的な振る舞いがソルバーによる数値シミュレーションにより可視化可能となり，理論的な解析の第一歩となった．

古典的な GMRES 法を用いて連立１次方程式を解く場合，一般的に，j 回目の反復における近似解について，相対残差ノルムが十分小さくなることを反復終了条件とすることが多い．しかし，既に述べたように，離散型線形悪条件問題は摂動に弱く不安定である．さらに，測定誤差を含む右辺ベクトルに対して連立１次方程式の近似解を求める場合，相対残差ノルムが小さくなることは，必ずしも近似解が真の解に近づくことを意味するものではない．

本研究では，相対残差ノルムに代わる反復終了のための指標として，Tikhonov 正則化に基づく値を新たに提案する．また，その値を問題の制約条件に用いることで，適当な近似解の決定を可能とする GMRES 法の新しい算法を提案した．

(2) 悪条件問題に対する正則化手法として従来から用いられている代表的なものに，Tikhonov 正則化がある．本研究では，制約条件を用いて最適な近似解を決定するために，新しい Simplified Tikhonov 閾値を提案することができた．すなわち，離散型線形悪条件問題に対する GMRES 法における制約条件として新しい Tikhonov 正則化の条件を考案した．

Tikhonov 正則化は，パラメータを用いてバランスをとった残差ノルムと近似解ノルムの和が最小となるように近似解を決定する手法である．つまり，残差ノルムと近似解ノルムの影響力をパラメータを用いて適切に調整することになる．この閾値を利用することによって，従来の反復法で収束判定に用いられる残差ノルムに加え，近似解のノルムを近似解決定の指標として用いることができるようになった．GMRES 法は，元来，残差ノルムが反復回数の増加に応じて減少する数学的な性質を持つ算法の１つである．

一方，離散型線形悪条件問題の特徴である，係数行列 A の特異値がゼロ付近に多く分布する性質から，反復回数が増えると，右辺ベクトルに含まれる誤差である摂動が，小さな特異値によって増幅される傾向がある．その結果，近似解は増幅された摂動の影響で細かく大きな振動を持つことになり，近似解ノルムは増大していくことになる．そのため，反復を進めるほど両者の大きさは離れていくことになる．すなわち，残差ノルムはゼロに近づいていくが，近似解ノルムは発散していく．そこで，両者の対数をとることにより，大きさのバランスをとることを考えた．

その際，残差ノルム，近似解ノルムのいずれも反復回数 j に応じて一定の変化をする点を考慮し，対数の底を j とした．また，近似解のノルムを収束の指標として用いることは，反復を進めることで生じる摂動の影響を測るためであった．そのため，GMRES 法で与える初期近似解と反復で得られる近似解との差についてのノルムを測定することで，より純粋な摂動の影響を予測することにした．また，閾値の構成要素はすべて GMRES 法を実行する際に自然に現れる値である．よって，新たに必要となる計算量の負担は小さいと考えられる．

Simplified Tikhonov 閾値は，GMRES 法と共に用いることで，適応的なリスタートと，適当なタイミングで反復の終了が可能となった．さらに，閾値の構成要素はすべて GMRES 法を実行する際に自然に現れる値であり，新たに必要となる計算量の負担は小さい．よって，非適切な線形逆問題を解くソルバーとして利用可能な新しい算法が構築できた．

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　13　件）

① Y. Matsuo and T. Nodera, An Efficient Implementation of the Block Gram-Schmidt Method, The ANZIAM J.，査読有， Vol. 54, pp. C394-C409, 2013.

② A. Sh. Lyubanova and A. Tani, An Inverse Problem for Pseudoparabolic Equation of Filtration: the Stabilization, Appl. Anal.，査読有，Vol. 92, (2013)，pp. 573-585.

③ M. Umehara and A. Tani, Free boundary Problem of the One-dimensional Equations for Viscous and heat-conductive Gaseous Flow under the Self-gravitation, Math. Models Mech. Appl. Sci.，査読有，Vol. 23, (2013)，pp. 1377-1419.

④ L. Zhang, K. Moriya, and T. Nodera, Two-level Parallel Preconditioning derived from an approximate inverse based on the Sharman-Morrison formula, The ANZIAM J.，査読有，Vol. 54 (E), (2012)，pp.E1-E25.

⑤ N. Kuroiwa and T. Nodera, New Stopping Rule: GMRES for Linear Discrete Illposed Problems, Keio Math. Sem. Report.，査読無，2-1, (2012).

⑥ Y. Matsuo and T. Nodera, Parallel Gram-Schmidt Orthogonalization with Optimal Block-size, VECPAR2012，Proceedings，査読有，(2012)，pp. 51-52.

⑦ 田村 要三，Limiting Behavior of Multi-dimensional Diffusion Process in Levy Environments with Different Indices,”統計数理研究所共同研究レポート，査読無，Vol. 275, (2012)，pp. 129-135.

⑧ A. Tani, Global Solution to the Conserved Phase-field Equation of Penrose--Fife type, Comm. Appl. Anal.，査読有，16，(2012)，pp. 703-726.

⑨ 黒岩 奈保，野寺 隆「離散型線形悪条件問題に対する修正 GMRES 法」，情報処理学会論文誌，査読有，Vol.52, (2011)，pp. 2812-2821.

⑩ J. Shiroishi and T. Nodera, A GMRES(m) Method with Two Stage Deflated Preconditioners, The ANZIAM J.，査読有，Vol. 52, (2011)，pp. C222-C236.

⑪ Y. Matsuo and T. Nodera, The Optimal Block Size for the Block Gram-Schmidt Orthogonalization, J. of Science and Technology，査読有，

Vol.49, (2011), pp.348-354.

⑫ S. Kondo and A. Tani, On the Hasegawa-Wakatani Equations with Vanishing Resistivity, Proc. Japan Acad. Ser. A Math. Sci., 査読有, Vol. 9, (2011), pp. 156-166.

⑬ 間淵 聡, 藤代 一成, 大野 義夫, SPH ベースリアルタイム火炎シミュレーション, 情報処理学会論文誌, 査読有, Vol. 52, (2011), pp. 2965-2972.

〔学会発表〕(計 13 件)

① 中村 貴稔, 野寺 隆, 非対称行列系に対する柔軟な ILU 分解前処理について, 日本応用数理学会研究部会連合発表会『行列・固有値問題の解法とその応用』, 京都大学, 2014 年 3 月 20 日.

② 沓掛 拓朗, 野寺 隆, Deflated GMRES 法の効率のよい近似逆前処理, 第 76 回情報処理学会全国大会, 東京電気大学, 2014 年 3 月 11 日～13 日.

③ T. Kutsukae and T. Nodera, Effective Approximate Inverse Preconditioner for deflated FGMRES,″ 2014 ACCEE, Phuket, Thailand, March 14-16, 2014.

④ K. Teramoto and T. Nodera, A Note on Lanczos Algorithm for Computing PageRank, 3rd Annual International Conference on Computer Mathematics, Computational Geometry & Statistics (CMCGS 2014), Singapore, pp. 12-15, Feb. 4-5, 2014.

⑤ 沓掛 拓朗, 野寺 隆, Flexible Deflated GMRES 法の収束性の改善について, 情報処理学会第 75 回全国大会, 東北大学, 2013 年 3 月 6 日～8 日.

⑥ 中村 貴稔, 野寺 隆, Flexible な ILU 分解の GMRES 法への応用, 情報処理学会第 75 回全国大会, 東北大学, 2013 年 3 月 6 日～8 日.

⑦ A. Tani, Two phase free boundary problem of Magnetohydrodynamics, Workshop on Boundary Phenomena for Evolutionary Partial Differential Equations, Institute of Mathematics, Academia Sinica, Taipei, ROC, April 19-20, 2013.

⑧ 谷 温 之, Glass transition: introductory survey, 現象解析特別セミナー第 3 回, 群馬大学, 2013 年 3 月.

⑨ 谷 温之, Astrophysical hydrodynamics I, II, 現象解析特別セミナー第 4 回, 東京理科大学, 2013 年 9 月.

⑩ Y. Matsuo and T. Nodera, An Efficient Implementation of the Block Gram-Schmidt Method, CTAC 2012 in Brisbane, Australia, Sept. 23-26, 2012.

⑪ 松尾 洋一, 野寺 隆, 適切な block-size の決定法を用いた Block Gram-Schmidt 法の並列化, HPC-134(2), pp.1-4, 電気通信大学, 2012 年 6 月 1 日.

⑫ 上中 貴統, 野寺 隆, 複素行列に対する RL-GMRES 法の有効性について, 情報処理学会第 74 回全国大会, 名古屋工業大学, 2012 年 3 月 6 日～8 日.

⑬ N. Kuroiwa and T. Nodera, Constructing Approximate Solutions in Regularization Methods for Linear Discrete Ill-Posed Problems, Science MATLAB workshop 2011, Keio University, Oct. 19, 2011.

〔図書〕(計 1 件)

① 野寺 隆, 共立出版, 「数式処理と計算ツール」, 『情報学基礎』, 慶應義塾大学理工学部編, 2013 年, pp. 122-133.

〔その他〕

なし

６．研究組織

(1)研究代表者

野寺 隆 (Nodera Takashi)
慶應義塾大学理工学部・教授
研究者番号：５０１５６２１２

(2)研究分担者

谷 温之 (Tani Atsushi)
慶應義塾大学理工学部・名誉教授
研究者番号： ９０１１８９６９

大野 義夫 (Ohno Yoshio)
慶應義塾大学理工学部・名誉教授
研究者番号：２００５１８６５

山本 喜一(Yamamoto Yoshikazu)
慶應義塾大学理工学部・旧教授
研究者番号：２００５１８７３

田村 要造 (Tamura Youzou)
慶應義塾大学理工学部・教授
研究者番号：５０１７１９０５